

Institut für Reaktorwerkstoffe
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
des Landes Nordrhein-Westfalen

Zur Bildung von Defekt-Kaskaden in Kristallen
beim Beschuß mit energiereichen Teilchen

von

Chr. Lehmann

Jül - 3 - RW

Oktober 1960



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 3
Institut für Reaktorwerkstoffe Jül – 3 – RW

Dok.: Crystal Lattices – Radiation Effects * DK 548.0 : 539.1

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Zur Bildung von Defekt-Kaskaden in Kristallen beim Beschuß mit energiereichen Teilchen*

Von CHR. LEHMANN

(Lehrstuhl für Physikalische Grundlagen der Reaktorwerkstoffe, Technische Hochschule Aachen,
und Institut für Reaktorwerkstoffe der Kernforschungsanlage Jülich)

Mit 14 Textabbildungen

(Eingegangen am 31. Oktober 1960)

Zusammenfassung. Die Ausbildung von Defektkaskaden in Kristallen unter Beschuß von energiereichen Teilchen wird theoretisch untersucht. In Erweiterung der bekannten Modelle von KINCHIN und PEASE [1] sowie von SEITZ, HARRISON [2], SNYDER und NEUFELD [3] werden verschiedene Stoßgesetze behandelt. Ferner wird der Einfluß der Annahme über die Befreiung eines Atoms aus seinem Gitterplatz genauer untersucht. Für den Mittelwert und die Schwankung der Defektzahlen in einer Kaskade lassen sich Integralgleichungen aufstellen. Diese Integralgleichungen werden für verschiedene Modelle diskutiert, um die Empfindlichkeit von Mittelwert und Schwankung gegenüber Veränderungen im Stoßgesetz und in der Entkommwahrscheinlichkeit festzustellen.

Für Kaskaden mit großen Defektzahlen ergibt sich, daß die Resultate mit den bekannten Modellen übereinstimmen, also weitgehend unabhängig sowohl vom Stoßgesetz als auch von den Annahmen über den Befreiungsprozeß sind.

I. Einleitung

Wenn man die durch Bestrahlung bei Kristallen auftretenden Änderungen physikalischer Eigenschaften verstehen will, muß man in erster Linie wissen, welcher Art die hervorgerufenen Gitterstörungen sind. Heute macht man sich darüber, jedenfalls bei einfachen Metallen und homöopolaren Kristallen, auf die wir uns hier beschränken wollen, das folgende Bild: Einfallende Teilchen hoher Energie übertragen durch Stöße Energie auf die Atome des Kristallgitters. Ist die übertragene Energie groß genug, so verläßt das angestoßene Atom (Primäratom) seinen Gitterplatz und wird ins Zwischengitter verlagert. Im einfachsten Fall entsteht am Stoßort eine Leerstelle und zwischen regulären Gitterplätzen ein Zwischengitteratom, also ein Frenkel-Defekt. Das Primäratom kann aber auch so viel Energie erhalten, daß es durch Stöße weitere Atome (Sekundäratome) verlagert und schließlich eine Kaskade von vielen Leerstellen und ebensovielen Zwischengitteratomen auslöst (Abb. 1). Diese Defektkaskaden sind besonders interessant bei der Bestrahlung von Kristallen mit energiereichen Teilchen.

In dieser Arbeit wird die Ausbildung solcher Defektkaskaden, die durch Primäratome in einatomigen Kristallen ausgelöst werden, eingehender betrachtet. Insbesondere sollen untersucht werden:

1. Die Zahl der Defekte in einer Kaskade in Abhängigkeit von der Energie des Primäratoms und die Schwankung, der diese Zahl unterworfen ist.
2. Der Einfluß des Stoßgesetzes zwischen den Atomen des Gitters auf die Zahl der Defekte und ihre Schwankung.
3. Der Einfluß des Elementarvorganges bei der Befreiung eines Atoms aus einem Gitterplatz. Der Elementarvorgang wird beschrieben durch eine Entkommwahrscheinlichkeit $P(T)$, wobei T die kinetische Energie des angestoßenen Gitteratoms ist. Unterhalb einer Schwellenenergie $T = E_d$ für den Verlagerungsvorgang soll $P = 0$ sein. Der Einfluß von thermischer Bewegung der Atome wird nicht berücksichtigt.

II. Stöße zwischen Atomen

Die Erzeugung von Defekten läßt sich durch Stöße beschreiben. Die wichtigste Größe bei solchen Stößen ist die Energie T , die von einem bereits ausgelösten Atom der kinetischen Energie E bei einem Stoß auf ein ruhendes Atom übertragen wird. Bei den vorwiegend interessierenden Materialien mit mittleren und hohen Atomgewichten sind diese Stöße elastisch [4], [5], d.h. die kinetische Energie E findet sich nach dem Stoß in der kinetischen Energie T des gestoßenen

Atoms und der kinetischen Energie E' des stoßenden Atoms vollständig wieder:

$$E = T + E'. \quad (\text{II.1})$$

Ferner ist die Behandlung der Stöße mit den Methoden der klassischen Mechanik ausreichend [4]. Die Energieübertragung beschreibt man am einfachsten mit dem differentiellen Streuquerschnitt $d\sigma$ [4]. Dabei bedeutet $d\sigma$ den Wirkungsquerschnitt dafür, daß das stoßende Atom (A) der Energie E auf das

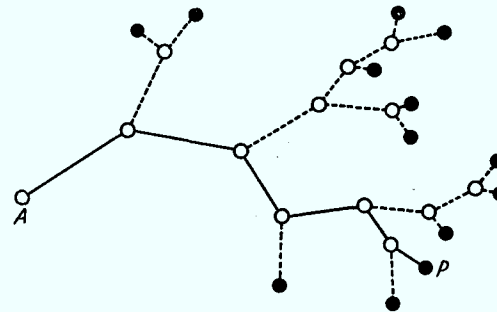


Abb. 1. Schematische Darstellung einer Defektkaskade, die durch ein Primäratom ausgelöst wird. A Auslösort des Primäratoms; P Primäratom; — Weg des Primäratoms; - - - Wege der verlagerten Atome; $\circ$ Leerstellen; $\bullet$ Zwischengitteratome

ruhende Atom (B) beim Stoß eine Energie zwischen T und $T + dT$ überträgt. Allgemein kann man schreiben

$$d\sigma = K(E, T) dT, \quad (\text{II.2})$$

wobei die Funktion $K(E, T)$ durch das Potential $V(r)$ zwischen den stoßenden Atomen bestimmt ist. Der totale Streuquerschnitt σ ergibt sich durch Integration von $d\sigma$ bis zur maximal übertragbaren Energie $T = E$

$$\sigma(E) = \int_0^E K(E, T) dT. \quad (\text{II.3})$$

Die Verteilung der auf B übertragenen Energien T wird charakterisiert durch das „Stoßspektrum“ g_B :

$$g_B(E, T) = \frac{K(E, T)}{\sigma(E)} \quad (\text{II.4})$$

falls $\sigma(E)$ existiert. Dann ist $g_B(E, T) dT$ die Wahrscheinlichkeit, daß die übertragene Energie im Intervall $(T, T + dT)$ liegt. Die Verteilung der verbleibenden Energie E' des

* D 82 (Diss. T.H. Aachen).

stoßenden Atoms A ist wegen des Energiesatzes (II.1)

$$\tilde{g}_A(E, E') = g_B(E, E - T) = g_A(E, T). \quad (\text{II.5})$$

Die Stoßspektren sind normiert:

$$\int_0^E g_B(E, T) dT = \int_0^E g_B(E, E - T) dT = 1. \quad (\text{II.6})$$

Man kann das Stoßgesetz auch durch die Energieverteilung $G(E; E', T)$ darstellen. $G(E; E', T) dE' dT$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, die Energien E' und T der beiden Stoßpartner nach dem Stoß in den entsprechenden Intervallen anzutreffen. Wegen des Energiesatzes (II.1) kann G durch die Abhängigkeit z. B. von T allein charakterisiert werden. Dann kann man unter Benutzung von (II.4) schreiben

$$G(E; E', T) = g_B(E, T) \cdot \delta(E - E' - T), \quad (\text{II.7})$$

wobei δ die Diracsche Deltafunktion bedeutet.

Für Potentiale $V(r)$, die erst im Unendlichen verschwinden, divergiert $K(E, T)$ in (II.2) für $T \rightarrow 0$ bei klassischer Rechnung. Für kleine T müßte man aber bei der Berechnung von

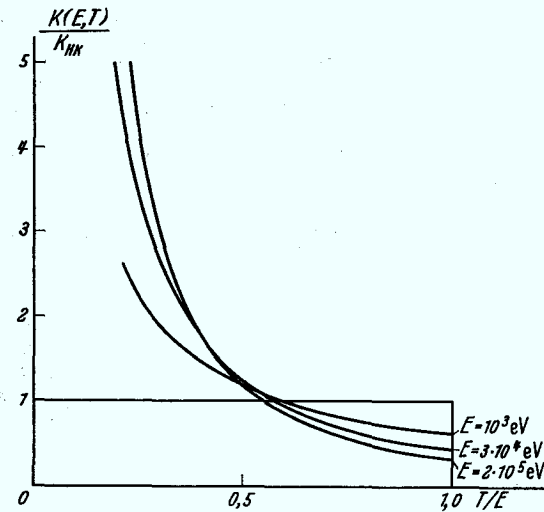


Abb. 2. Die Funktion $K(E, T)$ für abgeschirmte Coulomb-Potentiale (bezogen auf den Fall harter Kugeln) und verschiedene Primärenergien nach [6]. Die verwendeten Coulomb-Potentiale haben die Form $V(r) = (E_B/2)(a/r) \times \exp(-r/a)$. Die Kurven gelten für Kupfer mit $E_B \approx 10^4$ eV, $a \approx 0.2$ Å. Für harte Kugeln ist $K = K_{HK} = \pi R^2(E)/E$ mit $R(E)$ nach (II.8)

$K(E, T)$ Korrekturen berücksichtigen [6]. Diese sorgen im allgemeinen für die Beschränktheit von $K(E, T)$, werden aber erst bei sehr kleinen Energieübertragungen wichtig und spielen daher bei unseren Problemen keine Rolle.

Die Funktion $K(E, T)$ und damit die Stoßspektren g_A und g_B sind durch das Potential $V(r)$ bestimmt. Man steht bei der Berechnung von $K(E, T)$ aber vor zwei Schwierigkeiten. Einmal ist das Potential $V(r)$ im allgemeinen nicht gut bekannt und man ist daher auf mehr oder weniger plausible Annahmen angewiesen [4], [5], [7]. Zum anderen ist die klassische Berechnung des differentiellen Streuquerschnittes, selbst wenn $V(r)$ bekannt wäre, mathematisch kompliziert. Meist behandelt man angenommene Potentiale in „Harter-Kugel-Näherung“, d. h. man betrachtet die Atome als undurchdringliche Kugeln, deren (energieabhängiger!) Stoßradius der Minimalabstand R für Zentralstoß ist. Der Minimalabstand R ist erreicht, wenn beim Stoß die Relativgeschwindigkeit zwischen den Stoßpartnern Null ist. Es gilt als Bestimmungsgleichung für R :

$$V(R) = E/2. \quad (\text{II.8})$$

Der totale Streuquerschnitt (II.3) für harte Kugeln ist $\sigma = \pi R^2$. Das Stoßspektrum für harte Kugeln ist konstant (d. h. alle übertragenen Energien T kommen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vor):

$$\tilde{g}_A(E, E') = g_A(E, T) = g_B(E, T) = \frac{1}{E} \text{ für } 0 \leq T \leq E \quad (\text{II.9})$$

(sonst Null).

Über die Güte dieser Näherung läßt sich bisher nichts Quantitatives aussagen. In letzter Zeit wurden Untersuchungen

darüber angestellt. HOLMES et al. [6] haben für abgeschirmte Coulomb-Potentiale die Funktion $K(E, T)$ numerisch berechnet. In Abb. 2 ist diese Funktion, bezogen auf den Fall harter Kugeln, für verschiedene Primärenergien E aufgetragen. Die Abweichungen vom Fall harter Kugeln sind beträchtlich. Daher ist es um so wichtiger, den Einfluß von $g_B(E, T)$ auf die Zahl der Defekte in einer Kaskade zu untersuchen.

III. Die Erzeugung von Defekten

Über die Entstehung von Defektkaskaden durch ein energiereiches Primäratom sind bisher zwei einfache Vorstellungen entwickelt worden, die wir in den folgenden Abschnitten verallgemeinern werden.

Zunächst besprechen wir das Modell von KINCHIN und PEASE [1], dessen noch genauer zu umreißen Verallgemeinerung wir kurz das Modell der „ungebundenen“ Atome nennen wollen. Es wird im Abschnitt IV diskutiert.

Dann behandeln wir in Abschnitt V das Modell von SEITZ, HARRISON [2], SNYDER und NEUFELD [3], das sich als Spezialfall des allgemeineren Modells der „gebundenen“ Atome erweisen wird.

Beiden Modellen sind einige vereinfachende Annahmen gemeinsam:

1. Alle Stöße werden als Zweierstöße behandelt, d. h. ein durch das Gitter fliegendes Atom steht jeweils mit höchstens einem Atom des Gitterverbandes in Wechselwirkung.
2. Alle Stöße sind elastisch (vgl. Abschnitt II).
3. Alle Stöße finden zwischen einem schnell bewegten Atom und einem Atom auf einem regulären Gitterplatz statt. Das Gitteratom soll dabei vor dem Stoß als ruhend betrachtet werden, obwohl es thermische Schwingungen um seine Ruhelage ausführt; denn seine thermische Energie ist klein gegen die Schwellenenergie E_d .
4. Die periodische Anordnung der Atome im Gitter wird außer acht gelassen. Bei niedrigen Energien spielen zwar korrelierte Stöße, die auf Grund der periodischen Atomanordnung zustande kommen, eine Rolle (vgl. [8] bis [12]). Jedoch sollten diese korrelierten Stöße keinen wesentlichen Einfluß auf die hier interessierende Zahl der Defekte in einer Kaskade haben. Sie bestimmen lediglich ihre räumliche Ausdehnung. Hinsichtlich der unmittelbaren Umgebung eines Gitteratoms, der nächsten Nachbarn, kann jedoch die Regelmäßigkeit der Anordnung einen Einfluß haben, da sie die Wahrscheinlichkeit mitbestimmt, daß ein angestoßenes Atom seinen Gitterplatz verläßt und ins Zwischengitter gelangen kann (vgl. [4], [13], [14]).

Wir wollen nun kurz die beiden bisher bestehenden Modelle skizzieren und vergleichen.

Das Modell von KINCHIN und PEASE [1] besagt:

- a) Es gibt eine scharfe Auslöseenergie E_d für ein Atom im Gitter.
- b) Ein Stoßpartner, der mindestens die Energie E_d nach dem Stoß hat, verläßt den Stoßort mit unverminderter Energie. Hat er eine geringere Energie, so verläßt er den Stoßort nicht. Für Primärenergien $E < 2E_d$ ist also keine Erzeugung von zusätzlichen Defekten möglich.
- c) Die Wechselwirkung zwischen stoßenden Atomen sei die harter Kugeln (II.9).

Nun kann man eine einfache Integralgleichung für die mittlere Zahl $\bar{n}(E)$ der Atome in einer Kaskade aufstellen, die ein Primäratom der Energie $E \geq 2E_d$ auslöst. Die Zahl $\bar{n}(E)$ ist zu verstehen als Mittelwert über viele Kaskaden. Dabei wird das Primäratom stets mitgezählt. Hat das Primäratom einen zusätzlichen Defekt erzeugt, so sind zwei ausgelöste Atome vorhanden. Die Bilanzgleichung, daß $\bar{n}(E)$ gleich ist der Summe der von diesen beiden im weiteren Verlauf der Kaskade ausgelösten Atome, lautet

$$\bar{n}(E) = \frac{2}{E} \int_{E_d}^E \bar{n}(T) dT; \quad E \geq 2E_d \quad (\text{III.1})$$

mit $\bar{n}(E) = 1$ für $E \leq 2E_d$. Die vollständige Lösung lautet

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1; & 0 \leq E \leq 2E_d \\ E/2E_d; & 2E_d \leq E. \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

Im Modell von SEITZ et al. [2], [3] wird angenommen, daß jedes Gitteratom in einem Potentialtopf der Tiefe E_d sitzt. Bei einer Verlagerung kann daher das gestoßene Atom sich nur mit einer Energie weiterbewegen, die um E_d kleiner ist als die

beim Stoß übertragene, da es, um ins Zwischengitter zu gelangen, erst den Potentialtopf verlassen muß. Ein ausgelöstes Atom soll stets im Zwischengitter bleiben, im Gegensatz zum vorhergehenden Modell, wo das stoßende Atom den Platz des gestoßenen einnehmen kann. Damit beginnt hier die Produktion von verlagerten Atomen bereits bei $E = E_d$. Für $E \leq E_d$ ist $\bar{n} = 1$.

Die Bilanzgleichung lautet hier

$$\bar{n}(E) = \int_0^E \frac{1}{E} \bar{n}(T) dT + \int_{E_d}^E \frac{1}{E} \bar{n}(T - E_d) dT; \quad E \geq E_d \quad (\text{III.3})$$

mit $\bar{n} = 1$ für $E \leq E_d$. Nach Erweitern mit E und Differenzieren nach E erhält man eine Gleichung, die man rekursiv für zunehmendes E intervallweise lösen kann. Wegen der umfangreichen Berechnung des asymptotischen Verhaltens von $\bar{n}(E)$ verweisen wir auf [4] und [15]. Man erhält

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1; & 0 \leq E \leq E_d \\ 1 + \ln(E/E_d); & E_d \leq E \leq 2E_d \\ 0,561(E/E_d); & E \gg E_d \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

Für große Primärenergien ($E \gg E_d$) unterscheiden sich (III.2) und (III.4) um nur 10%.

Die beiden Modelle enthalten gegenüber den in Wirklichkeit vorliegenden Verhältnissen zwei stark idealisierende Annahmen, die wir später fallen lassen werden.

Zunächst wird die Auslöseenergie als scharf angenommen. Wegen der regelmäßigen Anordnung der nächsten Nachbarn eines Gitteratoms wird jedoch das Gitteratom zu seiner Verlagerung in verschiedenen Richtungen verschiedene Energien brauchen. Dies wird im folgenden durch eine Entkommwahrscheinlichkeit $P(T)$ (vgl. Abschnitt I) berücksichtigt, die für das Modell von SEITZ et al. bereits von einigen Autoren [15], [16] behandelt wurde.

Für $P(T)$ soll gelten

$$P(T) = \begin{cases} 0; & T < E_d \\ 1; & T > E'_d \geq E_d. \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

Den Verlauf zwischen E_d und E'_d lassen wir vorerst noch offen. Die Schwellenenergie E_d liegt nach theoretischen [14], [17] und experimentellen Untersuchungen [18], [19] für Metalle und homöopolare Kristalle in der Größenordnung von 25 eV. Die Energie E'_d konnte bisher weder theoretisch noch experimentell ermittelt werden. Nach Rechnungen von VINEYARD et al. [12] wird E'_d bei Kupfer vermutlich in der Größenordnung von 100 eV liegen. Die Berücksichtigung einer Verteilung der Auslöseenergie wird die Zahl $\bar{n}(E)$ der Verlagerungen in einer Kaskade wesentlich beeinflussen. Das asymptotische Verhalten ($E \gg E_d$) von $\bar{n}(E)$ wird nämlich durch die Ereignisse bei kleinen Energien ($E \approx E_d$) mitbestimmt, da alle ausgelösten Atome durch Stöße schließlich zu kleinen Energien gelangen. Man kann sich das drastisch veranschaulichen: Wenn in einer Kaskaden die letzte Generation der verlagerten Atome nicht geboren wird, ist die mittlere Anzahl der Defekte in dieser Kaskade um die Hälfte kleiner.

Ferner wird das Stoßgesetz harter Kugeln angenommen. Wir wollen später auch andere Stoßgesetze untersuchen.

IV. Das Modell der ungebundenen Atome

Das folgende Modell ist eine Verallgemeinerung der im Abschnitt III diskutierten Überlegungen von KINCHIN und PEASE [1]. Wir behalten hier die Auffassung bei, daß ein verlagertes Atom den Stoßort mit unverminderter Energie verläßt, also keine Arbeit gegen eine Bindungskraft zu leisten hat. In diesem Sinne sprechen wir von „ungebundenen“ Atomen. Abb. 3 zeigt die Art, in der man sich ein Atom im Gitter befestigt denken soll. Bei der Aufstellung der Gleichung für die als Mittelwert über viele Kaskaden zu verstehenden Zahl $\bar{n}(E)$ der durch ein Primäratom erzeugten Defekte in einer Kaskade beschreiben wir einen von LEIBFRIED [20] gezeigten Weg.

Die Ausbildung einer Kaskade ist nicht scharf definiert. Sie ist ein statistischer Vorgang, der durch

eine Wahrscheinlichkeit $w_n(E)$ beschrieben wird, mit der ein Primärteilchen der Energie E eine Kaskade mit genau n Frenkel-Defekten erzeugt. Unsere Aufgabe ist zunächst die Bestimmung von $w_n(E)$. Aus dieser Größe läßt sich neben der mittleren Zahl $\bar{n}(E)$ der Defekte auch ihre Schwankung und damit die Schärfe der Verteilung von $n(E)$ über viele Kaskaden ermitteln. Die wahrscheinlichkeitstheoretische Behandlung ermöglicht eine geschlossenere Darstellung des Problems und außerdem einen besseren Einblick

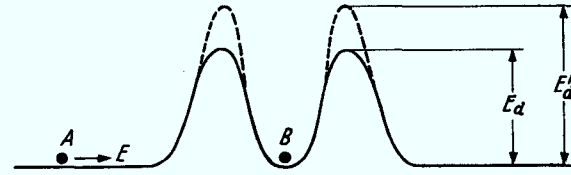


Abb. 3. Die beiden Stoßpartner vor dem Stoß im Modell der ungebundenen Atome. A Primäratom mit der Energie E im Zwischengitter; B ruhendes Gitteratom; — Potentialschwelle der Nachbaratome, die das Entkommen behindert; E_d Mindesthöhe der Potentialschwelle, die B umgibt; E'_d maximale Höhe der Potentialschwelle [Energie, von der ab die Entkommwahrscheinlichkeit Eins wird; vgl. (III.5)]

in den Mechanismus der Kaskadenbildung als dies durch eine Bilanzgleichung (vgl. Abschnitt III) mit einer summarischen Aussage über viele Kaskaden der Fall ist.

Wir gehen aus von einem bereits vorhandenen Primäratom mit einer kinetischen Energie E , das im Kristallgitter durch eine äußere Teilchenstrahlung ausgelöst worden ist. Die Ausbildung der Kaskade beginnt mit dem ersten Stoß des Primäratoms A auf ein ruhendes Gitteratom B. Unmittelbar nach diesem Stoß habe das Atom A die Energie E' und das Atom B die Energie T (Abb. 4). Die Ausbildung der Kaskade ist durch das weitere Schicksal von A und B bestimmt. Die Zahl der Defekte in der Kaskade ist gleich der Summe der von A und B insgesamt erzeugten Defekte. Dabei sollen A und B statistisch unabhängig weiterwirken. Die Wahrscheinlichkeit, daß beide Atome zusammen n Defekte bewirken, sei W_n . Sie hängt ab von der Primärenergie E , vom Stoßgesetz $G(E; E', T)$ nach (II.7) und von den Entkommwahrscheinlichkeiten¹ $P(T)$ und $P(E')$ der beiden Stoßpartner (vgl. Abschnitt III). Bei der Berechnung von $W_n(E', T)$ geht man schrittweise vor. Da der Primärdefekt stets mitgezählt wird, ist $W_0 = 0$. Bei der Berechnung von W_1 muß man drei Möglichkeiten unterscheiden:

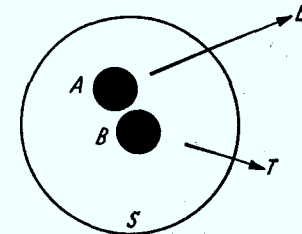


Abb. 4. Das Primäratom und sein erster Stoßpartner unmittelbar nach dem Stoß. A Primäratom mit der Energie E' ; B gestoßenes Gitteratom mit der Energie $T = E - E'$; S den Stoßort umgebende Sphäre, die durch die Potentialschwelle der Nachbaratome (Abb. 3) definiert ist

a) A bleibt nach dem Stoß innerhalb der Sphäre S (s. Abb. 4), B hingegen verläßt S und erzeugt mit der Wahrscheinlichkeit $w_1(T)$ genau ein Zwischengitter-

¹ Die Energieabhängigkeit der Entkommwahrscheinlichkeit wird für beide Stoßpartner als gleich angenommen. Das ist nicht selbstverständlich. Sie ist zunächst für ein Atom im Gitterverband gedacht, d.h., für das gestoßene Atom. Für das stoßende Atom hat die Entkommwahrscheinlichkeit sicher einen anderen Verlauf, denn es startet nach dem Stoß nicht von einem Gitterplatz aus. Nur der Einfachheit halber soll im folgenden die Entkommwahrscheinlichkeit für beide Stoßpartner durch dieselbe Funktion P beschrieben werden.

atom. Die Wahrscheinlichkeit für dieses Ereignis ist auftritt:

$$\{1 - P(E')\} P(T) w_1(T).$$

b) B bleibt innerhalb von S , A jedoch verläßt S und erzeugt mit der Wahrscheinlichkeit $w_1(E')$ genau ein Zwischengitteratom. Die Wahrscheinlichkeit für dieses Ereignis ist

$$\{1 - P(T)\} P(E') w_1(E').$$

c) A und B bleiben innerhalb von S . Die Wahrscheinlichkeit dafür ist

$$\{1 - P(E')\} \{1 - P(T)\}.$$

Damit ist die Wahrscheinlichkeit, daß A und B zusammen ein einziges Zwischengitteratom erzeugen,

$$W_1(E', T) = \{1 - P(E')\} P(T) w_1(T) + \{1 - P(T)\} P(E') w_1(E') + \{1 - P(E')\} \{1 - P(T)\}.$$

Entsprechend erhält man

$$W_2(E', T) = \{1 - P(E')\} P(T) w_2(T) + P(E') w_1(E') P(T) w_1(T) + \{1 - P(T)\} P(E') w_2(E')$$

und allgemein

$$W_n(E', T) = P(E') P(T) \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(E') w_{n-\mu}(T) + \{1 - P(E')\} P(T) w_n(T) + \{1 - P(T)\} P(E') w_n(E') + \delta_{n1} \{1 - P(E')\} \{1 - P(T)\} \quad \text{für } n \geq 1, \quad (IV.1)$$

wo δ_{n1} das Kronecker-Symbol bedeutet. Für die gesuchte Wahrscheinlichkeit $w_n(E)$ erhält man, indem man $W_n(E', T)$ unter Berücksichtigung von (II.7) nach E' und T integriert,

$$w_n(E) = \int W_n(E', T) G(E; E', T) dE' dT. \quad (IV.2)$$

Setzt man (II.7) und (IV.1) ein und führt die Integration nach E' aus, so erhält man schließlich als Integralgleichung für $w_n(E)$

$$w_n(E) = \int_0^E P(T) P(E-T) g_B(E, T) \times \left. \begin{aligned} &\times \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(T) w_{n-\mu}(E-T) dT + \\ &+ \int_0^E \{1 - P(T)\} P(E-T) \{g_B(E, T) + \\ &+ g_B(E, E-T)\} w_n(E-T) dT + \\ &+ \delta_{n1} \int_0^E \{1 - P(E-T)\} \{1 - P(T)\} \times \\ &\times g_B(E, T) dT \end{aligned} \right\} \quad (IV.3)$$

mit $w_n(E) = \delta_{n1}$ für $E \leq 2E_d$.

Die Gl. (IV.3) ändert sich nicht, wenn man $g_B(E, T)$ durch $g_B(E, E-T)$ ersetzt. Deshalb kann man mit

$$\left. \begin{aligned} g_B(E, E-T) + g_B(E, T) &= g_A(E, T) + g_B(E, T) \\ &= g_{AB}(E, T) \end{aligned} \right\} \quad (IV.4)$$

die Gl. (IV.3) so schreiben, daß das Stoßspektrum nur in der zu $T = E/2$ symmetrischen Form $g_{AB}(E, T)$

$$w_n(E) = \int_0^E P(T) P(E-T) g_{AB}(E, T) \times \left. \begin{aligned} &\times \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(T) w_{n-\mu}(E-T) dT + \\ &+ \int_0^E \{1 - P(T)\} P(E-T) \times \\ &\times g_{AB}(E, T) w_n(E-T) dT + \\ &+ \frac{1}{2} \delta_{n1} \int_0^E \{1 - P(E-T)\} \times \\ &\times \{1 - P(T)\} g_{AB}(E, T) dT. \end{aligned} \right\} \quad (IV.5)$$

Aus (IV.5) kann man die Integralgleichungen für $\bar{n}(E)$ und $\bar{n}^2(E)$ erhalten. Mit der Definition des Mittelwertes

$$\bar{n}(E) = \sum_n n w_n(E) \quad (IV.6)$$

erhält man aus (IV.5)

$$\bar{n}(E) = \int_0^E P(T) g_{AB}(E, T) \bar{n}(T) dT + \left. \begin{aligned} &+ \frac{1}{2} \int_0^E \{1 - P(T)\} \{1 - P(E-T)\} g_{AB}(E, T) dT. \end{aligned} \right\} \quad (IV.7)$$

Dabei wird benutzt, daß

$$\sum_n \sum_\mu n w_n(T) w_{n-\mu}(E-T) = \sum_\mu \sum_{\mu'} (\mu + \mu') w_\mu(T) w_{\mu'}(E-T) = \bar{n}(T) + \bar{n}(E-T),$$

wenn $\mu' = n - \mu$ als neuer Summationsindex eingeführt wird. In gleicher Weise erhält man mit der Definition des quadratischen Mittelwertes,

$$\bar{n}^2(E) = \sum_n n^2 w_n(E) \quad (IV.8)$$

unter Beachtung von

$$\sum_n \sum_\mu n^2 w_n(T) w_{n-\mu}(E-T) = \bar{n}^2(T) + \bar{n}^2(E-T) + 2\bar{n}(T)\bar{n}(E-T)$$

die Integralgleichung

$$\bar{n}^2(E) = \int_0^E P(T) g_{AB}(E, T) \bar{n}^2(T) dT + \left. \begin{aligned} &+ \frac{1}{2} \int_0^E \{1 - P(T)\} \times \\ &\times \{1 - P(E-T)\} g_{AB}(E, T) dT + \\ &+ \int_0^E P(T) P(E-T) g_{AB}(E, T) \times \\ &\times \bar{n}(T) \bar{n}(E-T) dT. \end{aligned} \right\} \quad (IV.9)$$

Die Gleichungen für $\bar{n}(E)$ und $\bar{n}^2(E)$ unterscheiden sich nur im dritten Term von (IV.9). Diese Inhomogenität ist aber bekannt, wenn man $\bar{n}(E)$ bestimmt hat. Die Nebenbedingungen für (IV.7) und (IV.9) lauten: $\bar{n}(E) = \bar{n}^2(E) = 1$ für $0 \leq E \leq 2E_d$.

Den hier aufgestellten Formalismus, der für beliebiges Stoßspektrum g und beliebige Entkommwahrscheinlichkeit P gilt, wollen wir nun auf verschiedene Fälle anwenden.

1. Das Stoßspektrum harter Kugeln
und verschiedene Entkommwahrscheinlichkeiten

Im Falle harter Kugeln erhält man nach (IV.7) und (II.9)

$$\bar{n}(E) = \frac{2}{E} \int_0^E P(T) \bar{n}(T) dT + \frac{1}{E} \int_0^E \{1 - P(T)\} \{1 - P(E - T)\} dT \quad (IV.10)$$

und nach (IV.9)

$$\bar{n}^2(E) = \frac{2}{E} \int_0^E P(T) \bar{n}^2(T) dT + \frac{1}{E} \int_0^E \{1 - P(T)\} \{1 - P(E - T)\} dT + \frac{2}{E} \int_0^E P(T) P(E - T) \bar{n}(T) \bar{n}(E - T) dT. \quad (IV.11)$$

Nach Erweitern mit E und Differenzieren nach E bekommt man aus beiden Integralgleichungen gewöhnliche Differentialgleichungen. Man erhält als Lösung von (IV.10)

$$\bar{n}(E) = \frac{1}{E} \exp \left\{ \int_0^E 2 P(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \right\} \times \exp \left\{ - \int_0^\eta 2 P(\eta') \frac{d\eta'}{\eta'} \right\} d\eta \quad (IV.12)$$

mit

$$I(\eta) = \int_0^\eta \{1 - P(\varrho)\} \{1 - P(\eta - \varrho)\} d\varrho.$$

Die Lösung von (IV.11) ist

$$\bar{n}^2(E) = \frac{1}{E} \exp \left\{ \int_0^E 2 P(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \right\} \times \exp \left\{ - \int_0^\eta 2 P(\eta') \frac{d\eta'}{\eta'} \right\} d\eta \quad (IV.13)$$

mit

$$H(\eta) = I(\eta) + \int_0^\eta 2 P(\varrho) P(\eta - \varrho) \bar{n}(\varrho) \bar{n}(\eta - \varrho) d\varrho.$$

Die Lösung (IV.12) erweist sich für $E \geq 2E'_d$ und eine nach (III.5) beliebige Entkommwahrscheinlichkeit P als linear:

$$\bar{n}(E) = \bar{n}(2E'_d) \frac{E}{2E'_d}; \quad E \geq 2E'_d. \quad (IV.14)$$

Die Proportionalitätskonstante kann durch die Auswertung bestimmter Integrale berechnet werden.

A. Die senkrechte Stufe

Für

$$P(E) = \begin{cases} 0; & E < E_d \\ 1; & E \geq E_d \end{cases} \quad (IV.15)$$

liegt der bereits in Abschnitt III behandelte Fall von KINCHIN und PEASE vor. Aus (IV.10) erhält man die bekannte Gl. (III.1) mit der Lösung

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1; & 0 \leq E \leq 2E_d \\ E/2E_d; & E \geq 2E_d. \end{cases} \quad (IV.16)$$

Aus (IV.13) erhält man

$$\bar{n}^2(E) = \begin{cases} 1; & E \leq 2E_d \\ 3\bar{n}; & 2E_d \leq E \leq 3E_d \\ 4\bar{n} \ln \frac{2}{3} \bar{n} + 4 - \bar{n}; & 3E_d \leq E \leq 4E_d \\ \bar{n}^2 + (4 \ln \frac{4}{3} - 1) \bar{n}; & 4E_d \leq E \end{cases} \quad (IV.17)$$

in Übereinstimmung mit [20]. Das Schwankungsquadrat ist für $E \geq 4E_d$ oder $\bar{n} \geq 2$

$$\bar{n}^2 - \bar{n}^2 = (4 \ln \frac{4}{3} - 1) \bar{n} = 0,15 \bar{n}. \quad (IV.18)$$

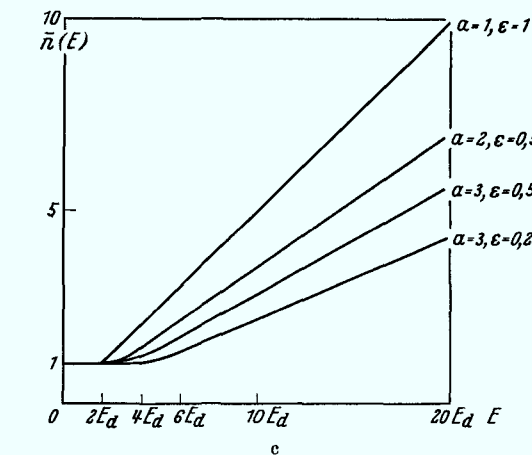
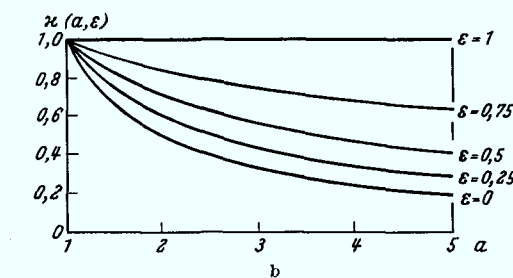
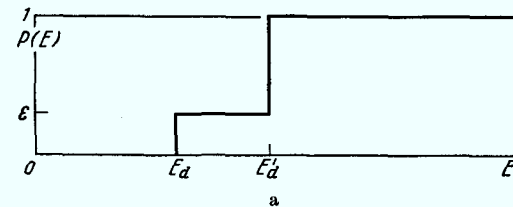


Abb. 5a–c. Die mittlere Zahl der Defekte in einer Kaskade für das Stoßspektrum harter Kugeln und die Doppelstufe als Entkommwahrscheinlichkeit. a Die Entkommwahrscheinlichkeit (IV.20); b der Faktor $\kappa(a, \varepsilon)$ nach (IV.22); c die mittlere Zahl der Defekte in einer Kaskade für verschiedene Wertepaare (a, ε)

Für größere Werte von $\bar{n}$ ist das relative Schwankungsquadrat

$$(\bar{n}^2 - \bar{n}^2)/\bar{n}^2 = 0,15/\bar{n} \quad (IV.19)$$

sehr klein.

B. Die senkrechte Doppelstufe

Eine weitere Modellfunktion $P(E)$ ist (s. Abb. 5a)

$$P(E) = \begin{cases} 0; & 0 \leq E < E_d \\ \varepsilon; & E_d \leq E < E'_d \\ 1; & E'_d \leq E \end{cases} \quad (IV.20)$$

mit den Parametern E_d , $E'_d \geq E_d$ und $\varepsilon (0 \leq \varepsilon \leq 1)$.

Zur Berechnung der Inhomogenität $I(E)$ in (IV.12) muß man die Fälle $E'_d \leq 2E_d$ und $E'_d \geq 2E_d$ gesondert

betrachten. Nach Einsetzen von $I(E)$ in (IV.12) erhält man die Funktion $\bar{n}(E)$. Wenn man sie für $E \leq 2E'_d$ berechnet hat, ist sie nach (IV.14) für alle E bekannt. Die Ergebnisse für $I(E)$ und $\bar{n}(E)$ sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Zum Vergleich mit dem Ergebnis (IV.16) der alten Theorie setzen wir im

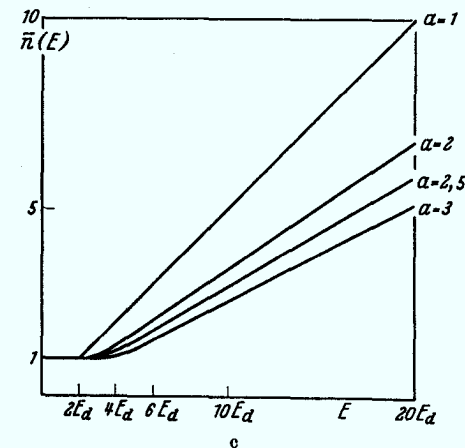
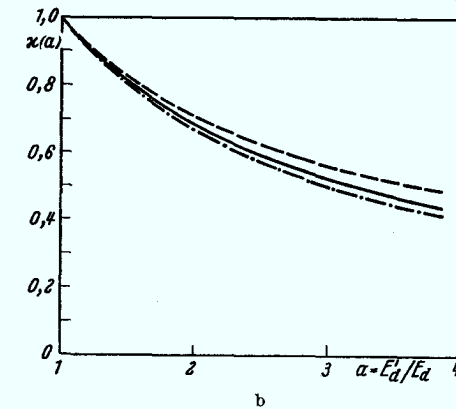
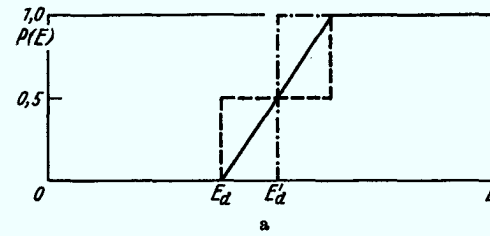


Abb. 6a-c. Die mittlere Zahl der Defekte in einer Kaskade für das Stoßspektrum harter Kugeln und die schräge Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit. a Die Entkommwahrscheinlichkeit (IV.23); - - - Verlauf zweiter grober Näherungen; b der Faktor $\kappa(a)$ nach (IV.25); - - - Verlauf für die Näherungen von $P(E)$; c die mittlere Zahl der Defekte in einer Kaskade für verschiedene Werte a

Bereich der linearen Abhängigkeit (IV.14)

$$\bar{n}(E) = \frac{E}{2E_d} \kappa(E'_d, \varepsilon). \quad (\text{IV.21})$$

Mit $E'_d/E_d = a$ wird nach Tabelle 1 und Gl. (IV.21)

$$\kappa(a, \varepsilon) = \begin{cases} \varepsilon^2 + \frac{4\varepsilon(1-\varepsilon)}{a+1} + \frac{1}{a}(1-\varepsilon)^2; & 1 \leq a \leq 2 \\ \frac{2}{a} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon^2}{1-2\varepsilon} \left[1 - \left(\frac{a}{2} \right)^{2\varepsilon-1} \right] + \frac{\varepsilon^2-1}{a+1} - \frac{1}{2}(1-\varepsilon)^2 \frac{a-1}{a+1} \right\}; & 2 \leq a \end{cases} \quad (\text{IV.22})$$

mit $0 \leq \varepsilon \leq 1$. In Abb. 5b ist $\kappa(a, \varepsilon)$ dargestellt. In den Grenzfällen $\varepsilon=0$ bzw. $\varepsilon=1$ liegt wieder der Fall einer einfachen Stufe vor mit E'_d bzw. E_d als Schwellenwert, wie es sein muß. In Abb. 5c ist $\bar{n}(E)$ für einige Wertepaare (a, ε) aufgetragen.

Wir haben die Behandlung der Doppelstufe durchgeführt, da die Lösung $\bar{n}(E)$ noch exakt angegeben werden kann. Für alle Funktionen P , die nicht stückweise konstant sind, treten in $\bar{n}(E)$ Integrale auf, die sich nur noch numerisch auswerten lassen. Das Resultat für die Doppelstufe wird uns außerdem einen wertvollen Vergleich mit der im folgenden behandelten schrägen Stufe liefern.

C. Die schräge Stufe

Eine den wirklichen Verhältnissen sicher angemessene Entkommwahrscheinlichkeit ist die stetige Funktion (s. Abb. 6a)

$$P(E) = \begin{cases} 0; & 0 \leq E \leq E_d \\ \frac{E-E_d}{E'_d-E_d}; & E_d \leq E \leq E'_d \\ 1; & E'_d \leq E \end{cases} \quad (\text{IV.23})$$

mit zwei Parametern E_d und $E'_d \geq E_d$. Die Berechnung der Inhomogenität $I(E)$ in (IV.12) ist sehr umständlich. Einfacher ist es, gleich die Ableitung dI/dE zu berechnen. Bei der Berechnung von $\bar{n}(E)$ nach (IV.12) muß man wieder die beiden Fälle $E'_d \leq 2E_d$ und $E'_d \geq 2E_d$ unterscheiden. Nach Einsetzen von dI/dE in (IV.12) und Auswerten der Integrale erhält man $\bar{n}(E)$. Die Ergebnisse für dI/dE und $\bar{n}(E)$ sind in Tabelle 2 zusammengestellt. Zum Vergleich mit der alten Theorie (IV.16) setzen wir im Bereich linearer Abhängigkeit (IV.14)

$$\bar{n}(E) = \frac{E}{2(E_d)_{\text{eff}}} = \frac{E}{2E_d} \kappa(E'_d); \quad E \geq 2E'_d. \quad (\text{IV.24})$$

Dabei bedeutet $(E_d)_{\text{eff}}$ eine senkrechte Ersatzstufe für die schräge Stufe der Entkommwahrscheinlichkeit. Mit $E'_d/E_d = a$ wird nach Tabelle 2 und Gl. (IV.24)

$$\kappa(a) = \begin{cases} \frac{4}{(a-1)^2} \left\{ a \ln \frac{2a}{a+1} - \ln \frac{a+1}{2} \right\}; & 1 \leq a \leq 2 \\ 2E_d \Phi(a) + \frac{1}{(a-1)^2} \left\{ 4a \ln \frac{2a}{a+1} - 4 \ln \frac{a+1}{a} + \frac{4}{a} - a \right\}; & 2 \leq a \end{cases} \quad (\text{IV.25})$$

mit

$$2E_d \Phi(a) = \left(\frac{1}{a} \right)^{\frac{2a}{a-1}} e^{2 \left(\frac{a-2}{a-1} \right)} \frac{2}{2^{a-1}} (a-1) \times \int_0^{\frac{a-2}{a-1}} x^2 e^{-2x} \left\{ 1 + x \left(\frac{a-1}{2} \right) \right\}^{\frac{2}{a-1}} dx;$$

Das Integral in (IV.25) läßt sich nur für ganzzahlige Werte von $2/(a-1)$ exakt berechnen. Sonst kann man es jedoch bequem nach oben und unten abschätzen; denn es gilt

$$1 \leq \left\{ 1 + x \left(\frac{a-1}{2} \right) \right\}^{\frac{2}{a-1}} \leq \left\{ 1 + \frac{a-1}{2} \right\}^{\frac{2}{a-1}}.$$

Tabelle 1. Die Funktionen $I(E)$ und $\bar{n}(E)$ für das Spektrum harter Kugeln und die doppelstufige Entkommwahrscheinlichkeit

E	$I(E)$	$\bar{n}(E)$	
$(0, E_d)$	E	1	$E'_d \leq 2E_d$
(E_d, E'_d)	$E(1-2\varepsilon) + 2\varepsilon E_d$	1	
$(E'_d, 2E_d)$	$-E + 2\varepsilon E_d + 2E'_d(1-\varepsilon)$	1	
$(2E_d, E'_d + E_d)$	$E(\varepsilon^2 - 1) + 2\varepsilon E_d(1-\varepsilon) + 2E'_d(1-\varepsilon)$	$\frac{E}{2E_d} \varepsilon^2 - (\varepsilon^2 - 1)$	
$(E'_d + E_d, 2E'_d)$	$-E(1-\varepsilon)^2 + 2E'_d(1-\varepsilon)^2$	$\frac{E}{2E_d} \varepsilon^2 + \frac{E}{E'_d + E_d} 2\varepsilon(1-\varepsilon) + (1-\varepsilon)^2$	
$(2E'_d, \infty)$	0	[s. (IV.14)]	
$(0, E_d)$	E	1	$E'_d \geq 2E_d$
$(E_d, 2E_d)$	$(E - E_d)(1-2\varepsilon) + E_d$	1	
$(2E_d, E'_d)$	$(E - 2E_d)(1-\varepsilon^2) + 2E_d(1-\varepsilon)$	$1 + \frac{\varepsilon^2}{1-2\varepsilon} \left[1 - \left(\frac{E}{2E_d} \right)^{2\varepsilon-1} \right]$	
$(E'_d, E'_d + E_d)$	$2(E_d + E'_d - E)(1-\varepsilon) + (1-\varepsilon)^2(E - 2E_d)$	$\frac{E}{E'_d} \left\{ \frac{\varepsilon^2}{1-2\varepsilon} \left[1 - \left(\frac{E'_d}{2E_d} \right)^{2\varepsilon-1} \right] + \varepsilon^2 \right\} - (\varepsilon^2 - 1)$	
$(E'_d + E_d, 2E'_d)$	$(2E'_d - E)(1-\varepsilon)^2$	$\frac{E}{E'_d} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon^2}{1-2\varepsilon} \left[1 - \left(\frac{E'_d}{2E_d} \right)^{2\varepsilon-1} \right] \right\} +$ $+ \frac{E}{E'_d + E_d} \frac{E_d}{E'_d} (\varepsilon^2 - 1) - \frac{E}{E'_d + E_d} (1-\varepsilon)^2 + (1-\varepsilon)^2$	
$(2E'_d, \infty)$	0	[s. (IV.14)]	

Tabelle 2. Die Funktionen dI/dE und $\bar{n}(E)$ für das Spektrum harter Kugeln und die schräge Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit

E	dI/dE	$\bar{n}(E)$	
$(0, E_d)$	1	1	$E'_d \leq 2E_d$
(E_d, E'_d)	$1 - 2 \frac{E - E_d}{E'_d - E_d}$	1	
$(E'_d, 2E_d)$	-1	1	
$(2E_d, E'_d + E_d)$	$-1 + \frac{1}{2} \left(\frac{E - 2E_d}{E'_d - E_d} \right)^2$	$1 - \frac{2E_d^2}{(E'_d - E_d)^2} + \frac{1}{2} \frac{E}{(E'_d - E_d)^2} \left\{ E - 4E_d \ln \frac{E}{2E_d} \right\}$	
$(E'_d + E_d, 2E'_d)$	$-\frac{1}{2} \left(\frac{E - 2E'_d}{E'_d - E_d} \right)^2$	$\frac{1}{2} \frac{E}{(E'_d - E_d)^2} \left\{ 4E'_d \ln \frac{E}{E'_d + E_d} - 4E_d \ln \frac{E'_d + E_d}{2E_d} - E + \frac{4E_d^2}{E} \right\}$	
$(2E'_d, \infty)$	0	[s. (IV.14)]	
$(0, E_d)$	1	1	$E'_d \geq 2E_d$
$(E_d, 2E_d)$	$1 - 2 \frac{E - E_d}{E'_d - E_d}$	1	
$(2E_d, E'_d)$	$1 - 2 \frac{E - E_d}{E'_d - E_d} + \frac{1}{2} \left(\frac{E - 2E_d}{E'_d - E_d} \right)^2$	$1 + E \Phi(E)$	
$(E'_d, E'_d + E_d)$	$-1 + \frac{1}{2} \left(\frac{E - 2E_d}{E'_d - E_d} \right)^2$	$1 + E \Phi(E'_d) + \frac{1}{2} \frac{E}{(E'_d - E_d)^2} \left\{ E - 4E_d \ln \frac{E}{E'_d} + \right.$ $\left. + \frac{4E_d^2 - E_d'^2}{E'_d} \right\} - \frac{2E_d^2}{(E'_d - E_d)^2}$	
$(E'_d + E_d, 2E'_d)$	$-\frac{1}{2} \left(\frac{E - 2E'_d}{E'_d - E_d} \right)^2$	$E \Phi(E'_d) + \frac{1}{2} \frac{E}{(E'_d - E_d)^2} \left\{ 4E'_d \ln \frac{E}{E'_d + E_d} - \right.$ $\left. - 4E_d \ln \frac{E'_d + E_d}{E'_d} + \frac{4E_d^2 - E_d'^2}{E'_d} + \frac{4E_d'^2}{E} - E \right\}$	
$(2E'_d, \infty)$	0	[s. (IV.14)]	

Dabei ist $\Phi(E) = \frac{1}{2E^2} \left(\frac{1}{E} \right)^{\frac{2E_d}{E_d - E_d}} e^{\frac{2E}{E_d - E_d}} \int_{\frac{2E_d}{E_d}}^E \left(\frac{\eta - 2E_d}{E'_d - E_d} \right)^2 e^{-\frac{2\eta}{E_d - E_d}} \frac{2E_d}{\eta^{\frac{2E_d}{E_d - E_d}}} d\eta; \quad 2E_d \leq E \leq E'_d$

Der Verlauf von $\kappa(a)$ ist in Abb. 6b dargestellt. Für $a=1$ ergibt sich $\kappa=1$, der Fall der senkrechten Stufe bei $E=E'_d$. Mit wachsendem a nimmt κ monoton ab. Das bedeutet nach (IV.24), daß die senkrechte Ersatzstufe der schrägen Stufe mit wachsendem E'_d zu

größeren Energiewerten wandert. Für $a \gg 1$ ist $\kappa(a) = \text{const}/a$. Die senkrechte Ersatzstufe rückt also wegen

$$(E_d)_{\text{eff}} = E_d \frac{a}{\text{const}} = \frac{E'_d}{\text{const}}; \quad a \gg 1$$

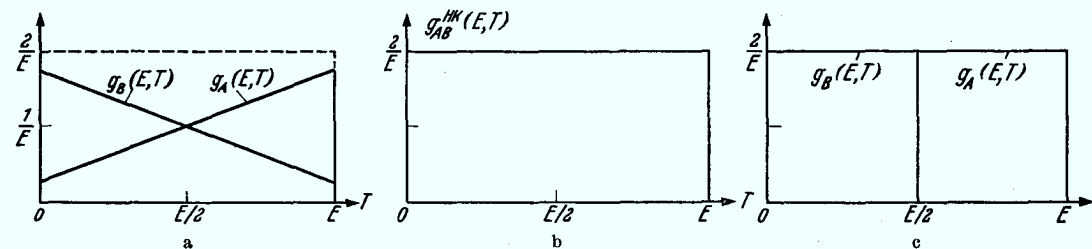
asymptotisch gegen $E = E'_d/\text{const.}$ Mit (IV.25) ergibt sich, da man für $a \gg 1$

$$\left\{1 + x \left(\frac{a-1}{2}\right)\right\}^{\frac{2}{a-1}} = 1$$

setzen kann,

$$(E_d)_{\text{eff}} = E'_d/2,37.$$

Die Ersatzstufe bleibt für alle a praktisch in der Mitte zwischen E_d und E'_d . Zur Übersicht ist in Tabelle 3 die Lage der Ersatzstufe für verschiedene a -Werte relativ zur Mitte $(E'_d + E_d)/2$ der schrägen Stufe aufgeführt. In Abb. 6c ist $\bar{n}$ für einige Werte a aufgetragen. Man kann einwenden, daß diese Kurven nur heuristischen Wert haben, da sie für eine im Intervall



(E_d, E'_d) ganz speziell verlaufende Funktion $P(E)$ berechnet worden sind, und daß für eine andere Funktion P ein ganz anderer Verlauf von $\bar{n}$ zu erwarten ist. Das ist aber offenbar nicht der Fall. Approximiert man in grober Weise den linearen Verlauf von $P(E)$

Tabelle 3. Relative Lage der Ersatzstufe für die schräge Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit

a	$\kappa(a)$	$\frac{(E_d)_{\text{eff}}}{\frac{1}{2}(E'_d + E_d)} = \frac{2}{\kappa} \frac{1}{a+1}$
1	1	1
1,5	0,80	1
2	0,68	0,98
3	0,52	0,96
$\gg 1$	$2,37/a$	0,85

zwischen E_d und E'_d durch eine Konstante vom Werte $\frac{1}{2}$ (s. Abb. 6a), so liegt genau der bei der Doppelstufe für $\varepsilon=1/2$ behandelte Fall vor. Ein Vergleich von $\kappa(a)$ für die schräge Stufe mit $\kappa(a, \varepsilon=1/2)$ für die Doppelstufe zeigt für nicht zu große a eine sehr gute Übereinstimmung (s. Abb. 6b). Bei $a=3$ z.B. ist die Abweichung erst 9%. Man kann die schräge Stufe $P(E)$ in grober Weise auch durch eine senkrechte Stufe bei $(E'_d + E_d)/2$ annähern (s. Abb. 6a). Der Faktor wird dadurch für $a=3$ um weniger als 5% geändert. Wir ziehen daraus den Schluß, daß κ und damit $\bar{n}$ vom Verlauf der Entkommwahrscheinlichkeit P zwischen E_d und E'_d nur wenig abhängen und daß man, wie bei [21], die Entkommwahrscheinlichkeit bei $P=1/2$ durch eine senkrechte Stufe ersetzen darf. Der Faktor κ bestimmt die Steigung in der für $E \geq 2E'_d$ linearen Abhängigkeit der Defektzahl $\bar{n}(E)$ von der Primärenergie. Da E'_d in der Größenordnung von 100 eV liegen wird, die Primärenergien bei Bestrahlung mit Protonen, Deuteronen oder Neutronen jedoch höher liegen, können die Diskrepanzen zwischen den bei diesen Strahlenarten experimentell ermittelten

Defektzahlen (vgl. [4]) nicht durch den Einfluß der Entkommwahrscheinlichkeit verursacht werden.

Wir haben bei allen Rechnungen angenommen, daß das Primäratom seinen Gitterplatz verlassen hat. Um die effektiv erzeugte Anzahl von Defekten zu erhalten, muß man den ermittelten Wert $\bar{n}(E)$ noch mit der Entkommwahrscheinlichkeit $P(E)$ für das Primäratom multiplizieren. Die Berücksichtigung einer Entkommwahrscheinlichkeit beeinflusst nicht nur die Erzeugung von Sekundäratomen, sondern auch die von Primäratomen.

Die Berechnung von $\bar{n}^2(E)$ ist sehr kompliziert. Wegen der vielen Fallunterscheidungen und des Auftretens nur numerisch auswertbarer Integrale wurde die Berechnung nicht durchgeführt.

2. Verschiedene Stoßspektren

In die Grundgleichung (IV.5) für die Wahrscheinlichkeiten $w_n(E)$ gehen die Stoßspektren der Atome nur in der nach (IV.4) symmetrisierten Form $g_{AB}(E, T)$ ein. Die Lösungen $\bar{n}$ und $\bar{n}^2$ der daraus abgeleiteten Gln. (IV.7) und (IV.9) sind daher gleich für alle Stoßgesetze mit gleichen $g_{AB}(E, T)$. So ergeben z.B. ein lineares Spektrum (Abb. 7a) und ein kastenförmiges Spektrum (Abb. 7b) identisch die gleiche Lösung wie das Spektrum harter Kugeln (Abb. 7c), obwohl der einzelne Stoßprozeß völlig verschieden ist vom Stoß zwischen harten Kugeln. Auf Grund dieser extremen Beispiele wird man einen nur geringen Einfluß der Stoßspektren auf die Zahl der Defekte in einer Kaskade erwarten. An Hand des exponentiellen und des kastenförmigen Stoßspektrums wird dies näher untersucht.

A. Das exponentielle Stoßspektrum und die senkrechte Stufe

Ein Stoßspektrum, das kleine Energieübertragungen bevorzugt, ist ein exponentielles Stoßspektrum der Form (s. Abb. 8)

$$g_B(E, T) = F(E) e^{-T/E_c}; \quad 0 \leq T \leq E \quad (\text{IV.26})$$

mit dem Parameter $E_c (0 \leq E_c < \infty)$. Der Faktor $F(E)$ ergibt sich aus der Normierungsbedingung (II.6) zu

$$F(E) = \{E_c (1 - e^{-E/E_c})\}^{-1}. \quad (\text{IV.27})$$

Eine identische Umformung von (IV.26) liefert

$$g_B(E, T) = \frac{e^{(E-2T)/2E_c}}{2E_c \sinh(E/2E_c)}; \quad 0 \leq T \leq E. \quad (\text{IV.28})$$

Weiter folgt

$$\begin{aligned} g_{AB}(E, T) &= g_B(E, E-T) + g_B(E, T) \\ &= \frac{\cosh(E-2T)/2E_c}{E_c \sinh E/2E_c}; \quad 0 \leq T \leq E. \end{aligned}$$

Tabelle 4. $\bar{n}^2(E)$ für das exponentielle Stoßspektrum (IV.26)

E	$\bar{n}^2(E)$
$(0, 2E_d)$	1
$(2E_d, 3E_d)$	$1 + 3G(E - 2E_d)$
$(3E_d, 4E_d)$	$1 + 3G(E - 2E_d) - \frac{1}{2} \left(\frac{E - 3E_d}{E_c} \right)^2 + 4G \cosh \frac{E_d}{E_c} \int_{3E_d}^E \ln \frac{\sinh \varepsilon/2 E_c}{\sinh 3E_d/2 E_c} d\varepsilon$
$(4E_d, \infty)$	$1 + 3G(E - 2E_d) + G^2(E - 4E_d)^2 + \frac{E_d}{2E_c^2} (7E_d - 2E) + 4G(E - 4E_d) \cosh \frac{E_d}{E_c} \ln \frac{\sinh 4E_d/2 E_c}{\sinh 3E_d/2 E_c} +$ $+ 4G \cosh \frac{E_d}{E_c} \int_{3E_d}^{4E_d} \ln \frac{\sinh \varepsilon/2 E_c}{\sinh 3E_d/2 E_c} d\varepsilon$

Dabei ist $G = \{2E_c \sinh(E_d/E_c)\}^{-1}$

Die Integralgleichung (IV.7) lautet mit der senkrechten Stufe (IV.15)

$$\bar{n}(E) = \int_{E_d}^E \bar{n}(T) \frac{1}{E_c} \frac{\cosh(2T - E)/2E_c}{\sinh E/2E_c} dT; \quad (IV.29)$$

$$E \geq 2E_d.$$

Sie läßt sich leicht in die Differentialgleichung

$$\sinh \frac{E}{2E_c} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \bar{n}(E) = 0$$

überführen, deren Lösung

$$\bar{n}(E) = D_1 + D_2 E$$

lautet. Die beiden Konstanten folgen aus $\bar{n}(2E_d) = 1$ und der Integralgleichung (IV.29). Für $\bar{n}(E)$ erhält man schließlich

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1; & 0 \leq E \leq 2E_d \\ 1 + \frac{E - 2E_d}{2E_c \sinh E_d/E_c}; & 2E_d \leq E. \end{cases} \quad (IV.30)$$

Der Parameter E_c , der für die Steilheit des Stoßspektrums (IV.26) verantwortlich ist, bestimmt den (linearen) Anstieg der Lösung für $E \geq 2E_d$. Für $E_c \rightarrow \infty$ geht (IV.26) in das Spektrum (II.9) über und die Lösung (IV.30) wird identisch mit der Lösung (IV.16) für harte Kugeln. Für $E_c \rightarrow 0$ wird aus (IV.26) $g_B(E, T) = \delta(T)$ d.h., das stoßende Atom behält seine Energie vollständig und gibt keine Energie an seine Stoßpartner ab. In diesem singulären Fall bleibt $\bar{n}(E)$ trivialerweise immer Eins. Für $E \geq 2E_d$ kann man (IV.30) auch schreiben:

$$\bar{n}(E) = 1 + \kappa(\lambda) \left\{ \frac{E}{2E_d} - 1 \right\} \quad (IV.31)$$

mit

$$\kappa(\lambda) = \frac{\lambda}{\sinh \lambda}; \quad \lambda = E_d/E_c. \quad (IV.32)$$

Die Funktion $\kappa(\lambda)$ ist in Abb. 9 aufgetragen. Für $\lambda = 0$ und $\lambda = \infty$ ergeben sich die oben diskutierten Grenzfälle.

Die bemerkenswerte Aussage unseres Resultates (IV.31) ist die Feststellung, daß mit zunehmender Steilheit (abnehmendes E_c) des Stoßspektrums die Zahl $\bar{n}$ der Defekte in einer Kaskade abnimmt. Das ist zu erwarten, da zunehmende Steilheit vermehrte Bevorzugung der Übertragung kleiner Energien und

damit zunehmende Verzettlung der Energie in Stößen ohne Verlagerung bedeutet. Eine quantitative Betrachtung zeigt aber (s. Abb. 9), daß für $E_c = E_d$ die

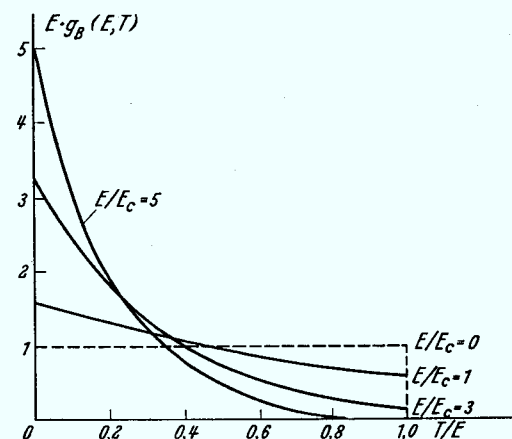


Abb. 8. Das exponentielle Stoßspektrum nach (IV.26) und (IV.27) (reduzierter Maßstab). — Exponentielles Spektrum für verschiedene Primärenergien; - - - zum Vergleich das Spektrum harter Kugeln

Abweichung vom Fall harter Kugeln nur 15% beträgt. Drastische Abweichung erhält man erst für $E_c \ll E_d$!

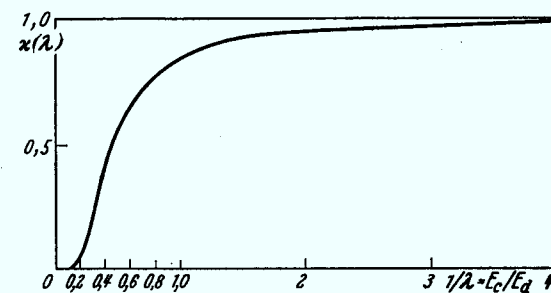


Abb. 9. Der Faktor $\kappa(\lambda)$ nach (IV.32)

Die Integralgleichung (IV.9) für $\bar{n}^2(E)$ ist ebenfalls nach Überführen in eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ohne grundsätzliche Schwierigkeiten lösbar. Die Lösung ist in Tabelle 4 zusammengestellt. Man kann sich davon überzeugen, daß für $E_c \rightarrow \infty$ der bekannte Fall (IV.17) harter Kugeln folgt und daß $\bar{n}^2$ für $E_c \rightarrow 0$ identisch Eins wird, wie es sein muß, da hier wegen $W_n = \delta_{n1}$ die Verteilung scharf ist, die Schwankung also verschwindet.

Für $E \geq 4E_d$ kann man E durch $\bar{n}(E)$ nach (IV.30) ausdrücken. Mit dem Resultat in Tabelle 4 erhält man als Schwankungsquadrat [vgl. (IV.18)]

$$\bar{n}^2(E) - \bar{n}(E) = B_2 \bar{n}(E) + B_1. \quad (\text{IV.33})$$

Die Konstanten B_2 und B_1 , die den Parameter E_c des Stoßspektrums enthalten, sind in Abb. 10 dargestellt. Die Konstante B_1 enthält den Eulerschen Dilogarithmus, der unter anderen von MITCHELL [22] tabelliert wurde.

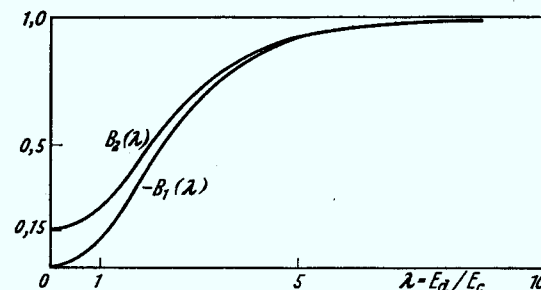


Abb. 10. Die Faktoren $B_1(\lambda)$ und $B_2(\lambda)$ in (IV.33)

Für Experimente mit energiereichen Neutronen ist im allgemeinen $\bar{n} \gg 1$ [man beachte, daß $\bar{n} \gg 1$ wegen (IV.30) $E \gg 2E_c \cdot \sinh E_d/E_c$ bzw. nach (IV.31) $E \gg 2E_d/\kappa(\lambda)$ bedeutet]. Für $\bar{n} \gg 1$ gilt nach (IV.33)

$$\bar{n}^2(E) - \bar{n}(E) \approx B_2 \bar{n}(E). \quad (\text{IV.34})$$

Damit wird das relative Schwankungsquadrat größer als im Falle harter Kugeln (IV.19), da $B_2(\lambda) \geq B_2(0)$

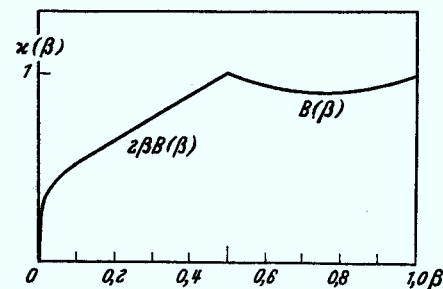


Abb. 11. Der Faktor $\kappa(\beta)$ in (IV.36)

ist. Praktisch wird aber $E_c \geq E_d$ sein. Dann ist (siehe Abb. 10) $B_2(\lambda) \approx B_2(0) = 4 \ln \frac{4}{3} - 1$ und das Schwankungsquadrat ändert sich gegenüber dem Fall harter Kugeln nicht. Auch hier ist also die Zahl der Defekte für große n -Werte nur einer geringen Streuung unterworfen.

B. Das Kastenspektrum

Ein Stoßspektrum, das in extremer Weise die in Wirklichkeit sicher (vgl. Abb. 3) vorhandene Übertragung kleiner Energien bevorzugt, ist ein konstantes Spektrum, das schon vor der maximal übertragbaren Energie verschwindet:

$$g_B(E, T) = \frac{1}{\beta E}; \quad 0 \leq T \leq \beta E \quad (\text{IV.35})$$

mit dem Parameter β ($0 \leq \beta \leq 1$). Für $\beta = 1$ liegt das bekannte Spektrum harter Kugeln vor.

Wir werden uns hier auf die Lösung der Gl. (IV.7) für $\bar{n}(E)$ beschränken. Das hierbei benutzte mathematische Verfahren wird im Anhang skizziert. Neben der Lösung für kleine Primärenergien (s. Anhang)

interessiert uns besonders die asymptotische Lösung. Asymptotisch ist

$$\bar{n}(E) = \frac{E}{2E_d} \cdot \kappa(\beta) = \frac{E}{2E_d} \begin{cases} 2\beta \cdot B(\beta); & 0 \leq \beta \leq 1/2; \\ B(\beta); & 1/2 \leq \beta \leq 1; \end{cases} \quad E \gg E_d/\beta \quad (\text{IV.36})$$

mit

$$B(\beta) = \beta \{ \beta - \beta^2 \ln \beta + (1 - \beta)^2 \ln(1 - \beta) \}^{-1}. \quad (\text{IV.37})$$

In Abb. 11 ist der Faktor $\kappa(\beta)$ aufgetragen. Man erkennt, daß für $\beta \geq 1/2$ die Zahl der Defekte sich maximal um nur 10% gegenüber dem Fall harter Kugeln ändert, also sehr unempfindlich selbst gegenüber drastischen Änderungen des Stoßspektrums ist.

V. Das Modell der gebundenen Atome

Nunmehr soll das bereits in Abschnitt III erwähnte Modell von SEITZ, HARRISON, NEUFELD und SNYDER näher betrachtet werden.

Während im Modell von KINCHIN und PEASE ein angestoßenes Atom seinen regulären Gitterplatz mit unverminderter Energie verlassen kann — sofern

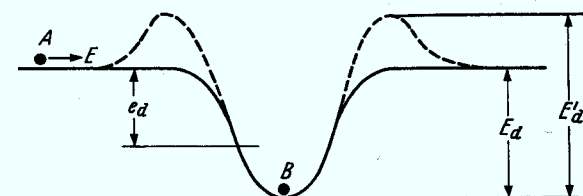


Abb. 12. Die beiden Stoßpartner vor dem Stoß im Modell der gebundenen Atome. A Primäratom mit der Energie E im Zwischengitter; B ruhendes Gitteratom; E_d Tiefe des Potentialtopfes, in dem das Atom A den Partner B spürt; e_d Energiegewinn des Primäratoms beim Eintauchen in den Potentialtopf; — — — Behinderung beim Entkommen durch die nächsten Nachbarn; E_d' Energie, von der ab die Entkommenswahrscheinlichkeit Eins wird

seine Energie nach dem Stoß über einer gewissen Schwellenenergie liegt — soll es nun beim Befreiungsprozeß eine feste Energie E_d verlieren. E_d soll dieselbe Energieschwelle sein wie im bisher behandelten Fall der „ungebundenen“ Atome. Dem liegt die physikalische Vorstellung zugrunde, daß jedes Gitteratom in einem Potentialtopf der Tiefe E_d sitzt und daß beim Befreiungsprozeß der Gewinn E_d an potentieller Energie von der beim Stoß erhaltenen kinetischen Energie geliefert werden muß. Da die Geschwindigkeiten der stoßenden Atome, falls sie noch Defekte erzeugen können, weit über der Schallgeschwindigkeit in Kristallen liegen, darf man während der Ausbildung einer Kaskade das jedes Atom umgebende Gitter als starr betrachten. Dann kann man von einer potentiellen Energie eines Gitteratoms sprechen und das Bild eines Potentialtopfes ist zulässig (Abb. 12). Man darf die Topftiefe E_d , die in der Größenordnung von 25 eV liegt, nicht mit der Bildungsenergie von Zwischengitteratomen gleichsetzen, die nur einige eV beträgt. Die Bildung von Zwischengitteratomen bei thermischem Gleichgewicht infolge der thermischen Schwankungen ist viel leichter, da die umgebenden Nachbaratome hier den Befreiungsvorgang unterstützen. Bei einer Verlagerung durch Stoß hingegen ist das umgebende Gitter starr und die Befreiung deshalb viel schwieriger.

SEITZ et al. nahmen an, daß der Stoß zwischen einem im Zwischengitter fliegenden Atom und einem

im Potentialtopf ruhenden Gitteratom am Rande des Topfes stattfindet, d.h. das stoßende Atom soll beim Stoß nicht in den Topf eintauchen. Diese völlig unsymmetrische Behandlung der Stoßpartner verbietet die Möglichkeit eines Ersetzungsstoßes und damit die Anwendung der Theorie auf strahlungsinduzierte Umordnungsprozesse in Legierungen.

Zunächst werden wir wie in Abschnitt IV die Wahrscheinlichkeit $w_n(E)$ dafür berechnen, daß ein vorhandenes Primäratom der Energie E eine Kaskade mit genau n Defekten erzeugt und dabei eine beliebige Entkommwahrscheinlichkeit P und ein beliebiges Stoßspektrum g berücksichtigen.

Später werden wir formal die Möglichkeit einräumen, daß der Stoß in beliebiger Höhe des Potentialtopfes stattfindet und den Fall völliger Symmetrie (Stoß im Potentialminimum) explizit behandeln.

1. Unsymmetrische Behandlung der Stoßpartner

Bei der Berechnung von $W_n(E', T)$ verwenden wir dieselben Bezeichnungen wie im Modell der ungebundenen Atome. Wieder ist $W_0 = 0$. Für die Berechnung von W_1 braucht man nur eine einzige Möglichkeit des Stoßablaufes zu betrachten: Das stoßende Atom A , das immer im Zwischengitter bleibt, erzeugt mit der Wahrscheinlichkeit $w_1(E')$ genau ein Zwischengitteratom und das Gitteratom B bleibt auf seinem Platz. Also

$$W_1(E', T) = w_1(E') \{1 - P(T)\}.$$

Die Erzeugung von zwei Zwischengitteratomen (und Löchern) kann auf zwei Wegen erfolgen:

- a) A erzeugt genau zwei Zwischengitteratome während B auf seinem Platz bleibt,
- b) A erzeugt genau ein Zwischengitteratom während B seinen Platz verläßt (wobei es die Energie E_d verliert und ebenfalls genau ein Zwischengitteratom erzeugt).

Also ist

$$W_2(E', T) = w_2(E') \{1 - P(T)\} + w_1(E') P(T) w_1(T - E_d).$$

Allgemein erhält man für $n \geq 1$

$$W_n(E', T) = w_n(E') \{1 - P(T)\} + \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(E') P(T) w_{n-\mu}(T - E_d). \quad (V.1)$$

Wie in (IV.2) gilt

$$w_n(E) = \int W(E', T) G(E; E', T) dE' dT \quad (V.2)$$

mit

$$G(E; E', T) = g_B(E, T) \delta(E - E' - T).$$

Setzt man (V.1) in (V.2) ein und führt die Integration über E' aus, so erhält man als Integralgleichung für $w_n(E)$

$$w_n(E) = \int_0^E g_B(E, T) w_n(T) \{1 - P(E - T)\} dT + \int_0^E g_B(E, T) P(E - T) \times \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(T) w_{n-\mu}(E - T - E_d) dT, \quad (V.3)$$

wobei w für negative Argumente stets verschwindet. Aus (V.3) folgt mit (IV.6) die Integralgleichung für $\bar{n}(E)$

$$\bar{n}(E) = \int_0^E \bar{n}(T) g_B(E, T) dT + \int_0^E \bar{n}(T - E_d) P(T) g_B(E, E - T) dT \quad (V.4)$$

und mit (IV.8) die Integralgleichung für $\bar{n}^2(E)$

$$\bar{n}^2(E) = \int_0^E \bar{n}^2(T) g_B(E, T) dT + \int_0^E \bar{n}^2(T - E_d) P(T) g_B(E, E - T) dT + 2 \int_0^E P(T) \bar{n}(E - T) \times \bar{n}(T - E_d) g_B(E, E - T) dT, \quad (V.5)$$

wobei $\bar{n}^2$ und $\bar{n}$ für negative Argumente stets verschwinden. Die Nebenbedingung für (V.4) lautet $\bar{n}(E) = 1$ für $0 \leq E \leq E_d$, wobei E_d wieder die Energieschwelle für Verlagerung ist. Das ist physikalisch einleuchtend, da erst von einer Primärenergie E_d ab ein weiteres Gitteratom ausgelöst, also ein zusätzlicher Defekt erzeugt werden kann (das Primäratom bleibt stets im Zwischengitter!). Die Nebenbedingung für (V.5) lautet $\bar{n}^2(E) = 1$ für $0 \leq E \leq E_d$, da hier $W_n = \delta_{n1}$, die Verteilung also scharf ist und daher die Schwankung verschwindet.

Diese Gleichungen für $\bar{n}(E)$ und $\bar{n}^2(E)$ unterscheiden sich nur durch die Inhomogenität in (V.5). Diese ist bekannt, wenn man $\bar{n}(E)$ bestimmt hat. Im Gegensatz zum Modell der ungebundenen Atome sind die beiden Gleichungen nicht invariant gegen Ersetzung von $g_B(E, T)$ durch $g_B(E, E - T)$.

Nun kann man wieder wie in Abschnitt IV für verschiedene Stoßspektren und Entkommwahrscheinlichkeit $\bar{n}$ sowie $\bar{n}^2$ berechnen. Wir wollen uns aber auf den Fall harter Kugeln beschränken und der Einfachheit halber die senkrechte Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit benutzen. Mit (II.9) und (IV.15) wird aus (V.4) die bereits bekannte Gl. (III.3)

$$\bar{n}(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \bar{n}(T) dT + \frac{1}{E} \int_{E_d}^E \bar{n}(T - E_d) dT, \quad (V.6)$$

wobei $\bar{n}(E) = 1$ für $0 \leq E \leq E_d$, und aus (V.5) wird

$$\bar{n}^2(E) = \frac{1}{E} \int_0^E \bar{n}^2(T) dT + \frac{1}{E} \int_{E_d}^E \bar{n}^2(T - E_d) dT + \frac{2}{E} \int_0^E \bar{n}(E - T) \bar{n}(T - E_d) dT, \quad (V.7)$$

wobei $\bar{n}^2(E) = 1$ für $0 \leq E \leq E_d$.

Die Gl. (V.6) hat nach [4], [15] die Lösung

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1; & 0 \leq E \leq E_d \\ 1 + \ln(E/E_d); & E_d \leq E \leq 2E_d \\ \simeq 0,561(1 + E/E_d); & 2E_d \leq E. \end{cases} \quad (V.8)$$

Für $0 \leq E \leq 2E_d$ ist die Lösung exakt. Für $E \geq 2E_d$ wurde die asymptotische Lösung angegeben, die aber schon von $2E_d$ ab eine sehr gute Näherung ist.

Die Gleichung für $\bar{n}^2$ wurde bereits von PÁL und NÉMETH [23] aufgestellt. Die von uns angegebene Herleitung ist wesentlich einfacher und umgeht die von den Autoren benutzen umfangreichen Methoden der mathematischen Statistik. Die asymptotische Lösung von (V.7) lautet nach [23]

$$\bar{n}^2(E) = (0,561 E/E_d)^2 + 0,0685 E/E_d. \quad (\text{V.9})$$

Für das Schwankungsquadrat folgt aus (V.8) und (V.9)

$$\bar{n}^2 - \bar{n}^2 = 0,122 \bar{n}.$$

Das relative Schwankungsquadrat $(\bar{n}^2 - \bar{n}^2)/\bar{n}^2 = 0,122/\bar{n}$ ist etwas kleiner als in (IV.19). Die Zahl der Defekte in einer Kaskade streut also für große Werte von $\bar{n}$ ebenfalls sehr wenig.

Die mittlere Zahl der Defekte im Fall harter Kugeln und schräger Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit wurde mit einer Näherungsmethode bereits von SAMPSON et al. [16] berechnet.

Eine weitere Verbesserung hat FEIN [15] versucht, indem er an Stelle des festen Energieabzugs E_d bei einer Verlagerung einen die Anisotropie des Gitters berücksichtigenden variablen Energieabzug eingeführt hat. Nach unserer Meinung ist dies aber nicht mit der Vorstellung des Potentialtopfes verträglich. Abgezogen werden darf nur die Energiedifferenz zwischen der Lage eines Atoms im Gitter und der mittleren Lage im Zwischengitter.

Wenn man die Anisotropie des Gitters in Betracht ziehen will, so kann man dies im Rahmen des hier behandelten Modells nur durch die Berücksichtigung einer Entkommwahrscheinlichkeit tun. Das durch die nächsten Nachbarn mehr oder weniger stark behinderte Entkommen kann sich physikalisch darin ausdrücken, daß der Rand des Potentialtopfes (s. Abb. 12) gegenüber dem Zwischengitterniveau in verschiedenen Richtungen verschieden stark überhöht ist.

2. Symmetrische Behandlung der Stoßpartner

Der vorgeführte Formalismus zur Bestimmung von $\bar{n}(E)$ und $\bar{n}^2(E)$ läßt sich auch auf den allgemeineren Fall anwenden, daß der Stoß zwischen den beiden Stoßpartnern in beliebiger Tiefe e_d (vgl. Abb. 12) des Potentialtopfes stattfindet ($0 \leq e_d \leq E_d$). Man muß beachten, daß nun die beim Stoß verfügbare Energie nicht E , sondern $E + e_d$ ist, da das mit der Energie E im Zwischengitter fliegende Atom vor dem Stoß noch die Energie e_d gewinnt. Jetzt lautet die Energiebilanz $E' + T = E + e_d$ unmittelbar nach dem Stoß. Die Energie e_d wird im allgemeinen von der Primärenergie und der Form des Potentialtopfes abhängen. Da jetzt die Möglichkeit des Einfangs besteht, muß man für beide Stoßpartner Entkommwahrscheinlichkeiten einführen. Für das gestoßene Atom B , das nach dem Stoß die Energie T hat, ist die Entkommwahrscheinlichkeit [vgl. (III.5)]

$$P_B = P(T) \quad (\text{V.10})$$

und für das stoßende Atom A , das nach dem Stoß die Energie E' hat, gilt

$$P_A = P(E' + E_d - e_d) = P(E - T + E_d), \quad (\text{V.11})$$

denn es hat unmittelbar nach dem Stoß die potentielle Energie $E_d - e_d$ gegenüber dem Topfboden.

Wieder ist $W_0 = 0$. Bei der Berechnung von W_1 muß man drei Fälle unterscheiden:

a) A bleibt nach dem Stoß im Topf, B verläßt ihn und erzeugt mit der Wahrscheinlichkeit $w_1(T - E_d)$ genau ein Zwischengitteratom.

b) A verläßt den Topf und erzeugt mit der Wahrscheinlichkeit $w_1(E' - e_d)$ genau ein Zwischengitteratom während B im Topf bleibt.

c) A und B bleiben im Topf.

Damit wird

$$W_1(E', T; e_d) = \{1 - P_A\} P_B w_1(T - E_d) + \{1 - P_B\} P_A w_1(E' - e_d) + \{1 - P_A\} \{1 - P_B\}.$$

Allgemein erhält man für $\bar{n} \geq 1$

$$W_n(E', T; e_d) = \left. \begin{aligned} &= P_A P_B \sum_{\mu=1}^{n-1} w_\mu(E' - e_d) w_{n-\mu}(T - E_d) + \\ &+ \{1 - P_B\} P_A w_n(E' - e_d) + \\ &+ \{1 - P_A\} P_B w_n(T - E_d) + \\ &+ \delta_{n1} \{1 - P_B\} \{1 - P_A\}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.12})$$

Aus (V.12) kann man wieder die Gleichungen für $w_n(E)$, $\bar{n}(E)$ und $\bar{n}^2(E)$ gewinnen.

Wir wollen zwei Grenzfälle mit der senkrechten Stufe als Entkommwahrscheinlichkeit näher betrachten: Den Stoß am Topfrand und den Stoß im Potentialminimum (Topfboden). Im ersten Fall ist $e_d = 0$ und daher $P_A = 1$. Man erhält die bekannte Lösung (V.8). Im zweiten Fall ist $e_d = E_d$. Die Entkommwahrscheinlichkeiten (V.10) und (V.11) haben dann denselben Verlauf. Als Integralgleichung für $\bar{n}$ erhält man

$$\bar{n}(E) = \left. \begin{aligned} &\int_0^{E+E_d} P(T) \bar{n}(T - E_d) \{g_B(E + E_d, T) + \\ &+ g_B(E + E_d, E + E_d - T)\} dT + \\ &+ \int_0^{E+E_d} \{1 - P(E + E_d - T)\} \{1 - P(T)\} \times \\ &\times g_B(E + E_d, T) dT, \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.13})$$

wobei $\bar{n}(E) = 1$ für $0 \leq E \leq E_d$. Man sieht, daß (V.13) invariant ist gegen die Ersetzung von $g_B(E + E_d, T)$ durch $g_B(E + E_d, E + E_d - T)$. Die beiden Stoßpartner werden also völlig symmetrisch behandelt. Die Gl. (V.13) läßt sich leicht lösen für die senkrechte Stufe (IV.15) als Entkommwahrscheinlichkeit und das Stoßgesetz harter Kugeln, das die erwähnte Energiebilanz berücksichtigt:

$$g_B(E + E_d, T) = 1/(E + E_d); \quad 0 \leq T \leq E + E_d.$$

Für $E \geq E_d$ kann man (V.13) in eine sehr einfache Differentialgleichung umwandeln. Die komplette Lösung von (V.13) lautet

$$\bar{n}(E) = \left\{ \begin{aligned} &1; & E \leq E_d \\ &\frac{1}{2E_d} (E + E_d); & E_d \leq E. \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.14})$$

Ein Vergleich mit der alten Lösung (V.8) von SKIRZ et al. zeigt, daß eine allgemeine Berücksichtigung der Eintauchtiefe e_d beim Stoß nur eine geringe Rolle spielen wird. Der Unterschied gegenüber (III.2) im

primitiven Modell von KINCHIN und PEASE ist nur bei kleinen Primärenergien wesentlich. Für große Energien werden (V.14) und (III.2) praktisch gleich. In Abb. 13 sind die verschiedenen Lösungen dargestellt.

VI. Ergebnisse

Die beim Bestrahlen von Kristallen mit energiereichen Korpustularstrahlen auftretenden Defekt-kaskaden wurden näher untersucht. Dazu wurde für ein ausgelöstes Primäratom die mittlere Zahl der Defekte $\bar{n}(E)$ in einer Kaskade und deren Schwankung $S = (\bar{n}^2 - \bar{n})/\bar{n}$ in Abhängigkeit von der Energie E des Primäratoms berechnet.

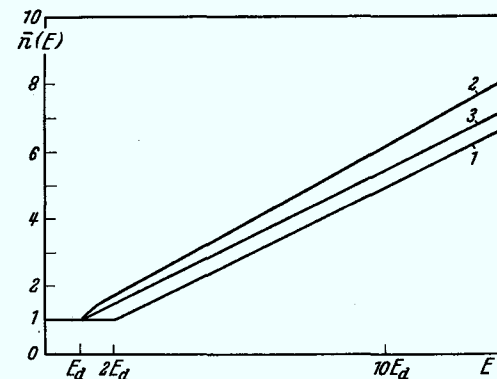


Abb. 13. Die mittlere Zahl der Defekte in einer Kaskade. 1 im Modell von KINCHIN und PEASE; 2 im Modell von SEITZ et al. (unsymmetrische Behandlung der Stoßpartner); 3 bei symmetrischer Behandlung der Stoßpartner im Potentialtopf

Untersucht wurde die Abhängigkeit der Größen $\bar{n}$ und S von

1. der Art, in der bei Stoßvorgängen Atome im Gitter befestigt sind (Verankerung),
2. den Annahmen über die Art der Befreiung von Atomen aus ihren Gitterplätzen,
3. dem Stoßgesetz zwischen Atomen.

Als Modell der Verankerung von Atomen im Gitter wurden die Vorstellungen von KINCHIN und PEASE [1] (Modell der „ungebundenen“ Atome) und von SEITZ et al. [2], [3] (Modell der „gebundenen“ Atome) erweitert und näher untersucht.

Die Verlagerung von Atomen aus ihren Gitterplätzen wird durch die nächsten Nachbarn erschwert. Den Einfluß dieser Anisotropie kann man durch verschiedene Entkommwahrscheinlichkeiten berücksichtigen. Es wurden die senkrechte Stufe, die schräge Stufe und die Doppelstufe untersucht.

Die Zweikörper-Stöße zwischen den Atomen lassen sich durch Stoßspektren beschreiben. Bei den Berechnungen wurden das konstante Spektrum harter Kugeln, ein lineares, ein exponentielles und ein kastenförmiges Spektrum herangezogen. Die wesentlichen Ergebnisse der behandelten Fälle (s. Abschnitte IV und V) sind für große Defektzahlen ($\bar{n} \gg 1$):

1. $\bar{n}$ und S hängen von den benutzten Verankerungsmodellen der Atome im Gitter praktisch nicht ab.
2. $\bar{n}$ ändert sich weniger mit dem Verlauf der Entkommwahrscheinlichkeit P als mit der Lage des Punktes $P=1/2$. In guter Näherung darf man die Entkommwahrscheinlichkeit durch eine senkrechte Stufe bei $P=1/2$ ersetzen.
3. $\bar{n}$ und S sind weitgehend unabhängig von der Form des Stoßspektrums. Der geringe Einfluß des

Stoßspektrums führt zu der Folgerung, daß man in wohl allen praktischen Fällen mit der mathematisch sehr angenehmen Näherung harter Kugeln auskommt. Die Schwankung S ist so gering, daß man für große Defektzahlen stets von einem scharfen Wert $\bar{n}$ sprechen darf.

Herrn Professor Dr. G. LEIBFRIED, danke ich für viele fruchtbare Anregungen und Diskussionen während der Anfertigung dieser Arbeit.

Anhang

Mit $E/E_d = x$ und $T/E_d = z$ erhält man aus (IV.7) unter Verwendung des Spektrums (IV.35) und der senkrechten Stufe (IV.15) die für die Lösung handlichere Differential-Funktionalgleichung

$$\frac{d}{dx} \{ \beta x \bar{n}(x) \} = \beta P(\beta x) \bar{n}(\beta x) + \bar{n}(x) - (1-\beta) P\{(1-\beta)x\} \bar{n}\{(1-\beta)x\} \quad (\text{A.1})$$

mit der Nebenbedingung $\bar{n}(x) = 1$ für $0 \leq x \leq 2$. Die Lösung läßt sich nicht in geschlossener Form angeben. Man kann aber die Lösung einerseits von kleinen Primärenergien x ausgehend gewinnen, und andererseits ihr asymptotisches Verhalten ermitteln. Da der Parameter β alle Werte von 0 bis 1 durchlaufen kann, sind zur Lösung Fallunterscheidungen erforderlich. Sie lassen sich an Hand von Abb. 14 bequem überblicken.

1. Die Lösung für kleine Primärenergien

Im Gebiet I (Abb. 14) ist $\bar{n} = 1$. Im Gebiet II ist ebenfalls $\bar{n} = 1$, wovon man sich an Hand von (A.1) überzeugen kann. Im Gebiet III wird aus (A.1)

$$\frac{d}{dx} \{ \beta x \bar{n}(x) \} = \beta \bar{n}(\beta x) + \bar{n}(x) \quad (\text{A.2})$$

mit $\bar{n}(x) = 1$ für $0 \leq x \leq 2$. Für $2 \leq x \leq 2/\beta$ ist $\bar{n}(\beta x) = 1$ und aus der Gl. (A.2) wird die lineare Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} \{ \beta x \bar{n}(x) \} = \beta + \bar{n}(x)$$

mit der Lösung

$$\bar{n}(x) = \frac{1}{1-\beta} \left\{ \left(\frac{x}{2} \right)^{\frac{1-\beta}{\beta}} - \beta \right\}.$$

Die Integrationskonstante wurde aus $\bar{n}(2) = 1$ bestimmt. Für $x \geq 2/\beta$ ist (A.2) ebenfalls eine lineare Differentialgleichung. Darin ist $\bar{n}(\beta x)$ eine bekannte Funktion, da für $\beta < 1$ (für $\beta = 1$ ist alles bekannt) das Argument βx stets in einem Gebiet liegt, indem die Lösung $\bar{n}(x)$ bereits bestimmt wurde. Man kann so die einfache Differentialgleichung (A.2) rekursiv lösen, was aber wegen der vielen erforderlichen Fallunterscheidungen sehr mühsam ist. Im Gebiet IV lautet (A.1)

$$\frac{d}{dx} \{ \beta x \bar{n}(x) \} = \beta \bar{n}(\beta x) + \bar{n}(x) - (1-\beta) \bar{n}\{(1-\beta)x\}. \quad (\text{A.3})$$

Wir geben die Lösung von (A.3) nur für zwei Teilgebiete von IV an, in denen (A.3) in eine gewöhnliche Differentialgleichung übergeht.

- a) $1/\beta \leq x \leq 2/(1-\beta)$ und $1/3 \leq \beta \leq 1/2$.

Hier ist $\bar{n}(\beta x) = \bar{n}\{(1-\beta)x\} = 1$.

Mit der Anschlußbedingung $\bar{n}(1/\beta) = 1$ lautet die Lösung

$$\bar{n}(x) = \frac{\beta}{1-\beta} (\beta x)^{\frac{1-\beta}{\beta}} - \left(\frac{2\beta-1}{1-\beta} \right).$$

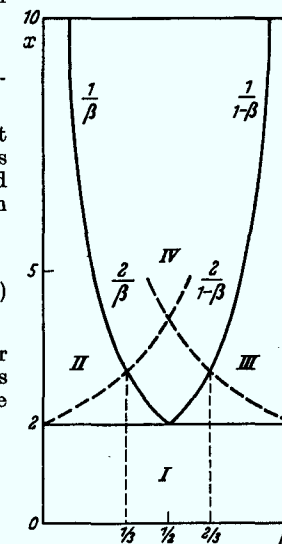


Abb. 14. Fallunterscheidungen im Lösungsbereich der (β, x) -Ebene

b) $1/(1-\beta) \leq x \leq 2/\beta$ und $1/2 \leq \beta \leq 2/3$.

Hier ist ebenfalls $\bar{n}(\beta x) = \bar{n}\{(1-\beta)x\} = 1$. Die Anschlußbedingung lautet aber nun anders. Paßt man die Lösung im Gebiet III bei $x=2/\beta$ an, so erhält man

$$\bar{n}(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{\frac{1-\beta}{\beta}} \left\{ \frac{1}{1-\beta} - [2(1-\beta)]^{\frac{1-\beta}{\beta}} \right\} - \left(\frac{2\beta-1}{1-\beta}\right).$$

Für $\beta=1/2$ folgt bekannterweise $\bar{n}(x)=1/2$.

Für größere x kann man (A.3) entsprechend dem Fall III für $x \geq 2/\beta$, rekursiv lösen.

Wir haben damit unsere Ausgangsgleichung (IV.7) für kleine x gelöst und sind in der Lage, von dieser Lösung ausgehend $\bar{n}(x)$ für größere x schrittweise zu bestimmen. Für die dabei erforderlichen Fallunterscheidungen muß man die (β, x) -Ebenen in ein Netz von Flächenstücken zerlegen und darin die Lösung jeweils gesondert bestimmen.

2. Die Lösung für große Primärenergien

Im Gebiet IV der (β, x) -Ebene gilt für $\bar{n}(x)$ die Gl. (A.3). Diese Gleichung kann man unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen asymptotisch ($x \gg 1$) lösen. Für $\beta \leq 1/2$ ist die Lösung exakt und für $\beta \leq 1/2$ läßt sich eine Näherungslösung angeben. Unangenehm ist, daß im Argument die Variable x mit einem Faktor behaftet ist. Durch eine geeignete Substitution kann man das Argument zerlegen in die isolierte Variable und ein additives Glied, das nur den Parameter β enthält. Dann kann man durch Anwendung der Laplace-Transformation eine Gleichung erhalten, in der alle Argumente nur noch die Variable selbst enthalten. Die Gleichung im Laplace-Raum ist zudem algebraisch. Aus der Laplace-Transformierten läßt sich das asymptotische Verhalten von $\bar{n}(x)$ ermitteln.

Für $0 \leq \beta \leq 1/2$ ist die Nebenbedingung zu (A.3)

$$\bar{n}(x) = 1; \quad 0 \leq x \leq 1/\beta.$$

Führt man als neue Variable $y = \ln(\beta x)$ ein, so wird aus (A.3)

$$\beta \frac{d}{dy} f(y) = \beta f(y + \ln \beta) + (1-\beta)f(y) - (1-\beta)f\{y + \ln(1-\beta)\}$$

mit der Nebenbedingung $f(y)=1$ für $-\infty \leq y \leq 0$. Nach Anwendung der Laplace-Transformation

$$\int_0^{\infty} f(y) e^{-sy} dy = F(s)$$

erhalten wir die Gleichung

$$\beta \{-1 + sF(s)\} = \beta \frac{1}{s} (1-\beta^s) + \beta^{s+1} F(s) + (1-\beta)F(s) - (1-\beta) \frac{1}{s} (1-[1-\beta]^s) - (1-\beta)^{s+1} F(s)$$

mit der Lösung

$$F(s) = \frac{s\beta + 2\beta - 1 - \beta^{s+1} + (1-\beta)^{s+1}}{s\{s\beta + \beta - 1 - \beta^{s+1} + (1-\beta)^{s+1}\}}.$$

Die Funktion $f(y)$ erhält man aus $F(s)$ durch die Umkehrung der Laplace-Transformation

$$f(y) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+\sigma_0}^{i\infty+\sigma_0} e^{sy} F(s) ds; \quad \text{Re}(s) = \sigma > \sigma_0.$$

Das Verhalten von $f(y)$ für $y \gg 1$ kann man untersuchen, indem man die Singularitäten von $F(s)$ untersucht (siehe G. DOETSCH [24], Bd. II).

Die für den asymptotischen Verlauf von $f(y)$ entscheidende Singularität ist ein Pol erster Ordnung bei $s=1$. Weitere Singularitäten von $F(s)$ können nur verschwindende Beiträge liefern, da die im folgenden ermittelte Funktion $\bar{n}(x)$, wie man

sich durch Einsetzen leicht überzeugt, für $x \gg 1$ die Gl. (A.3), von der wir ausgegangen sind, befriedigt. Asymptotisch gilt also

$$f(y) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+\sigma_0}^{i\infty+\sigma_0} e^{sy} F(s) ds \simeq \frac{1}{2\pi i} 2\pi i \text{Res}\{e^{-sy} F(s)\}_{s=1} \simeq e^y B(\beta)$$

mit $B(\beta)$ nach (IV.37). Macht man die Substitution $y = \ln(\beta x)$ rückgängig, so erhält man asymptotisch

$$\bar{n}(x) \simeq x\beta B(\beta); \quad x \gg 1/\beta; \quad 0 \leq \beta \leq 1/2$$

bzw. (IV.36).

Für $1/2 \leq \beta \leq 1$ kann man die asymptotische Lösung nur näherungsweise angeben. Wenn man den letzten Term auf der rechten Seite der Gl. (A.3) wegläßt, so hat man die exakte Gl. (A.2) für das Gebiet III. Näherungsweise kann man (A.2) durch (A.3) ersetzen. Der Fehler wird nicht groß sein, denn im Gebiet III ist $\bar{n}\{(1-\beta)x\} = 1$, so daß sich dort (A.2) und (A.3) nur durch die additive Konstante $(1-\beta) < 1/2$ unterscheiden. Für $\beta \approx 1$ ist die Näherung sicher sehr gut, ebenfalls für $\beta \approx 1/2$, da dort der Bereich III in x -Richtung wenig ausgedehnt ist; dazwischen wird die Näherung noch brauchbar sein. Wir können also $\bar{n}(x)$ durch (A.3) sowohl im Gebiet IV als auch im Gebiet III beschreiben. Die Nebenbedingung lautet

$$\bar{n}(x) = 1; \quad 0 \leq x \leq 2; \quad 1/2 \leq \beta \leq 1.$$

Mit der Substitution $z = \ln(x/2)$ wird aus (A.3)

$$\beta \frac{d}{dz} g(z) = \beta g(z + \ln \beta) + (1-\beta)g(z) - (1-\beta)g\{z + \ln(1-\beta)\}$$

mit der Nebenbedingungen $g(z)=1$ für $-\infty \leq z \leq 0$. Abgesehen von der Substitution ist alles dasselbe wie für $0 \leq \beta \leq 1/2$ wenn man dort $g(z)$ an die Stelle von $f(y)$ setzt. So erhält man als asymptotischen Verlauf von $g(z)$

$$g(z) \simeq e^z B(\beta); \quad z \gg 1$$

und daraus für den asymptotischen Verlauf von $\bar{n}(x)$ die Form

$$\bar{n}(x) \simeq x^{\frac{1}{2}} B(\beta); \quad x \gg 2; \quad 1/2 \leq \beta \leq 1$$

bzw. (IV.36).

Literatur: [1] KINCHIN, G.H., and R.S. PEASE: Rep. Progr. Phys. **18**, 1 (1955). — [2] HARRISON, W.A., and F. SEITZ: Phys. Rev. **98**, 1530 (1955). — [3] SNYDER, W.S., and J.S. NEUFELD: Phys. Rev. **97**, 1636 (1955). — [4] SEITZ, F., and J.S. KOEHLER: Solid State Physics, Vol. 2, p. 305. 1956. — [5] DIENES, G.J., and G.H. VINEYARD: Radiation Effects in Solids. New York: Interscience Publishers 1957. — [6] HOLMES, D.K., G. LEIBFRIED and O.S. OEN: Report ORNL-2829, S. 1 (Aug. 1959). — [7] BOHR, N.: Kgl. danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd. **18**, 8 (1948) (Kap. IV). — [8] SILSBEE, R.H.: J. Appl. Phys. **28**, 1246 (1957). — [9] LEIBFRIED, G.: J. Appl. Phys. **30**, 1388 (1959). — [10] THOMPSON, M.W.: Phil. Mag. **4**, 139 (1959). — [11] VINEYARD, G.W. et al.: J. Appl. Phys. **30**, 1322 (1959). — [12] GIBSON, J.B., A.N. GOLAND, M. MILGRAM and G.H. VINEYARD: Report BNL 4871. — [13] BROWN, W.L., and W.M. AUGUSTYNIAK: Bull. Amer. Phys. Soc. **2**, (2), 156 (1957). — J. Appl. Phys. **30**, 1300 (1959). — [14] KOHN, W.: Phys. Rev. **94**, 1409 (1954). — [15] FEIN, A.E.: Phys. Rev. **109**, 1076 (1957). — [16] SAMPSON, J.B., H. HURWITZ and H.F. CLANCY: Phys. Rev. **99**, 1657 (1955). — [17] HUNTINGTON, H.B.: Phys. Rev. **93**, 1414 (1954). — [18] KLONTZ, E.E.: AEC Report AECU-2664 (1952). — Phys. Rev. **82**, 763 (1951); **86**, 643 (1952). — [19] EGGEN, D.T., and M.J. LAUBENSTEIN: Phys. Rev. **91**, 238 (1955). — [20] LEIBFRIED, G.: Nukleonik **1**, 57 (1958). — [21] CORBETT, J.W., J.M. DENNEY, M.D. FISKE and R.M. WALKER: Phys. Rev. **108**, 954 (1957). — [22] MITCHELL, K.: Phil. Mag. **40**, 351 (1949). — [23] PÁL, L.J., e G. NÉMETH: Nuovo Cim. **12**, 293 (1959). — [24] DOETSCH, G.: Handbuch der Laplace-Transformation. Basel: Birkhäuser 1950.